

Curriculum Vitae di Maurizia Palummo

(Orcid <https://orcid.org/0000-0002-3097-8523>, ResearchId: AAC-1949-2021)
<https://www.fisica.uniroma2.it/elenco-telefonico/palummo/>

Formazione/Esperienza Professionale:

Posizione attuale: Professore Ordinario presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Roma "Tor Vergata" (UTOV)
2024-2017: Professore Associato presso il Dipartimento di Fisica di UTOV
2017-2004: Ricercatore presso il Dipartimento di Fisica di UTOV
2004-1999: Ricercatore INFN a tempo determinato presso il Dipartimento di Fisica di UTOV
1998-1996: Assegnista presso il Dipartimento di Fisica di UTOV
1996-1995: Assegnista presso il centro di ricerca ENEA Casaccia
1995-1994: Assegnista INFN presso il Dipartimento di Fisica di UTOV
1994-1991: Dottorato in Fisica presso UTOV
Dicembre 1989: Laurea "cum laude" in Fisica presso UTOV

Esperienza scientifica:

Dopo un periodo iniziale di ricerca in Fisica della Materia Condensata sperimentale sulle proprietà ottiche dei difetti e dei centri di colore nelle matrici isolanti, lavoro da molti anni nel campo dei calcoli da primi principi delle proprietà strutturali ed elettroniche ed ottiche dei materiali.

Durante la tesi di dottorato, ho iniziato a concentrarmi sui calcoli ab-initio, all'interno della teoria del funzionale della densità (DFT) e della teoria delle perturbazioni a molti corpi (MBPT), studiando le proprietà elettroniche dei composti semiconduttori ad ampio band-gap, come il GaN, includendo le correzioni di self-energia elettronica. Dopo il 1996 ho lavorato sulle proprietà elettroniche, ottiche lineari e non lineari di diverse superfici semiconduttrici e metalliche, pure o coperte da adsorbenti atomici e molecolari. In particolare sono diventata esperta nel calcolo degli spettri di anisotropia di riflettanza (RAS) e di riflettività differenziale superficiale (SDR). Dopo il 2005, la mia attività di ricerca si è concentrata sullo studio di primi principi degli effetti a molti corpi delle superfici di materiali semiconduttori a band-gap grande e piccola, nonché sulla risposta dielettrica e sulle eccitazioni elettroniche dei sistemi a bassa dimensionalità come i nanofili di Ge e Si. Negli ultimi anni, i materiali bidimensionali, i composti organici e i materiali per applicazioni energetiche come le perovskiti, sono il principale oggetto della mia attività di ricerca. Attraverso il mio lavoro, ho acquisito competenze nella fisica computazionale e mi sono familiarizzata con le teorie e gli strumenti computazionali più moderni dei calcoli di struttura elettronica dei primi principi (Car Parrinello, metodo GW, calcolo degli eccitoni BSE, parallelizzazione). Sono membro del team di sviluppatori/superutenti del codice many-body yambo (www.yambo-code.org).

Una descrizione più dettagliata dei principali argomenti di ricerca degli ultimi 15 anni viene ora illustrata:

2024-2021 i) caratterizzazione teorica degli eccitoni *out-of-plane* delle perovskiti stratificate senza piombo, calcolo della struttura fine degli eccitoni delle perovskiti stratificate bidimensionali a base di stagno e di piombo (**invited talk n. 45, 44, 43, 40; pubblicazioni n. 152,149,146,138**) ii) estensione e applicazione della formulazione spinoriale BSE ai monostrati dei dicalogenuri dei metalli di transizione (Transition Metal Dichalcogenides (TMD)) (**invited talk n. 42, pubblicazione n.131**) iii) studio delle proprietà elettroniche ed ottiche con metodi DFT e in alcuni casi post-DFT di nuovi materiali bidimensionali e di omo ed etero-bilayers Van der Waals (vdW) di materiali 2D per applicazioni opto-elettroniche (**invited talk n.41,39,38,37 publ. n 153, 150, 148, 145, 143, 142,140, 137,135,134**) iv) studio teorico-sperimentale dell'instabilità eccitonica e condensazione di eccitoni in TMD-T' (**invited n.40, publ. n. 139**)

2020-2018 i) studio degli effetti a molti corpi delle perovskiti doppie e delle perovskiti ibride stratificate bidimensionali (**invited talk n.38, 36, talk n. 18,19, publ n. 124,122,112,110**) ii) Sviluppo di un approccio ab-initio per calcolare i tempi di vita radiativi dei materiali da 0D a 3D (**invited talk n. 37, publ. n. 117,115, 111**) iii) studio delle proprietà elettroniche e ottiche e dell'instabilità eccitonica dei TMD-T' in forma tetragonale distorta (**invited n. 35, publ. n. 128, 116**) iv) caratterizzazione delle proprietà eccitoniche delle interfacce 2D basate sul fosforene per applicazioni in fotocatalisi (**invited talk n. 37, 32 publ. n. 130, 114**) v) studio con metodi DFT e post-DFT delle proprietà elettroniche e ottiche lineari e non lineari di materiali bidimensionali e layered (**invited n. 32,31,30, 29 publ. n.123, 119, 118**)

2017-2014 i) studio degli effetti a molti corpi nelle perovskiti ibride stratificate (**invited n 29, talk 18,19, publ. n.112**) 2D

ii) Sviluppo di un approccio ab-initio per calcolare i tempi di vita radiativi dei materiali bidimensionali con un'attenzione particolare ai 2D-TMD (**invited n. 30, 26,19,18 publ. n.102**) iii) tempi di vita non radiativi elettrone-fonone ab-initio nei materiali ossidi e 2D-TMD (**invited n. 26, 24,17,15 publ. n. 103**) , iv) studio ab-initio delle proprietà elettroniche di nanofili del gruppo IV e del loro politipismo e la sua influenza sulle proprietà elettroniche e ottiche (**invited. n.30,14, publ n. 107, 104, 99, 95**) eccitoni e i loro picchi ottici nel bulk e nelle nanosheets di TiO₂ in forma anatase (**invited n.30 . n. 108,105, 91**)

2013-2011 i) simulazione ab-initio dello stato fondamentale e dello stato eccitato di cristalli e oligomeri di porfirine (**publ. n 97, 96,89**) ii) calcoli GW risolti per spin sui livelli di dogaggio nei nanofili di silicio iii) effetti della self-energia ed effetti eccitonici nei materiali bidimensionali (TMD, nitrato di boro e carbonio ibridizzato, materiali bidimensionali di tio₂,(**invited n. 13,12,11,10,9 talk n.17, 16, pubbl. n. 87,88**) iv) efficienza di conversione fotovoltaica di etero-bilayers 2D-TMD e bilayer di grafene/TMD per celle solari eccitoniche ultrasottili mediante simulazioni ab-initio DFT e MBPT (**invited 13,12, 11, 10 publ. n.92**) v) studio teorico delle proprietà elettroniche di oligomeri di porfirine e della tautomerizzazione di porfirine a base libera deposte su substrato (**publ. n. 89, 96**)

2010-2009 i) studio teorico delle proprietà elettroniche e ottiche delle porfirine a base libera basato sulla teoria del funzionale della densità e sulla teoria delle perturbazioni a molti corpi (**invited n. 8, n. 16 publ. n70**) ii) studio delle proprietà elettroniche ed ottiche di nanowire di Si e, Ge e SiGe. (**invited n. 6,7,8,9, talk n.9, publ. n 79,78,77,76,75,74,71,68,66**)

Principali Collaborazioni scientifiche esterne a UTOV negli ultimi 15 anni:

G. Giorgi (Univ. Perugia), K. Yamashita (Tokyo Univ.), D. Varsano (S3-CNR Modena), G. Cicero (PoliTO), M. Re Fiorentin (PoliTO), M. Amato (Paris Sud), A. Zobelli (Paris Sud), E. Cannuccia (Univ. Marseille), C. Attacalite (CNRS, Marseille) J.C. Grossman (MIT), M. Bernardi (Caltech), D. Sangalli (CNR-ISM), A. Marini (ISM-CNR Rome), L. Chiodo (Campus Biomedico Roma), R. Rurali (ICMAB, Barcelona), S. Ossicini (Modena Univ.), A. Rubio (San Sebastian, Spain), J. Even (Univ. of Rennes)

Parole scientifiche chiave:

ab-initio, DFT, GW, BSE, eccitoni, superfici, interfacce, materiali organici, nanomateriali, fotovoltaico
Metodologie di investigazione: simulazioni ab-initio di stato fondamentale ed eccitato: Codici ad onde piane con PBS
Quantum-espresso, ABINIT, VASP; Codici Many-body: YAMBO, EXC, DP etc
Linguaggi di programmazione: f90, scripts shell, python

Impatto scientifico:

Autrice di più di 150 articoli (140 su isi web), la maggioranza su riviste scientifiche internazionali peer-reviewed, alcuni capitoli di libri, 4 articoli di review. Fra tutti gli articoli: 1 Nat Physics, 1 Nat. nanotechnology, 1 Nat Comm, 1 Chem Rev, 2 Advanced Functional Materials, 2 ACS nano, 1 ACS energy letter, 5 Nano Letters, 2 npj 2D Materials and Applications, 2 Advanced Optical Materials, 5 JPCL, 5 PRL, 2 JPCC, 2 JCP, 29 PRB

Numero di citazioni totali (isi/Google scholar) : **6383/8099**

Numero di citazioni totali senza self-citazioni (isi) : **6097**

Media : (isi): **44.03**

h-index (isi/Google Scholar): **37 / 41**

Lista delle 10 pubblicazioni fra le più rilevanti degli ultimi 15 anni:

10 Excitons and light-emission in semiconducting MoSi₂X₄ two-dimensional materials

M Sun, M Re Fiorentin, U Schwingenschlögl, **M. Palummo** npj 2D Materials and Applications, 6, Article number: 81 (2022)

9 A monolayer transition metal dichalcogenide as a topological excitonic insulator D Varsano, **M Palummo**, E Molinari, M Rontani Nature Nanotechnology 15 (5), 367-372 (2020)

8 Optical Properties of Lead-Free Double Perovskites by Ab Initio Excited-State Methods **M.Palummo**, Eduardo Berrios, Daniele Varsano, Giacomo Giorgi ACS Energy Letters 5,457 (2020)

7 Nature of the Electronic and Optical Excitations of Ruddlesden–Popper Hybrid Organic–Inorganic Perovskites: The Role of the Many-Body Interactions G Giorgi, K Yamashita, **M Palummo** The journal of physical chemistry letters 9 (19), 5891-5896 (2018)

6 Theory and Ab Initio Computation of the Anisotropic Light Emission in Monolayer Transition Metal Dichalcogenides H.Y. Chen; **M. Palummo**; D. Sangalli ; M. Bernardi Nano Letters 18 , 6 3839-3843 (2018)

5 Optical emission in hexagonal SiGe nanowires X Cartoixa, **M Palummo**, HIT Hauge, EPAM Bakkers, R Rurali Nano

letters 17 (8), 4753-4758

4 *Crystal phase effects in si nanowire polytypes and their homojunctions* M Amato, T Kaewmaraya, A Zobelli, **M Palummo**, R Rurali Nano letters 16 (9), 5694-5700 (2016)

3 *Exciton Radiative Lifetimes in Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides* **M.Palummo** M. Bernardi J.C. Grossman Nano Letters 15 (5), 2794 (2015)

2 *Silicon-germanium nanowires: chemistry and physics in play, from basic principles to advanced applications*

M Amato, **M Palummo**, R Rurali, S Ossicini Chemical reviews 114 (2), 1371-1412 (2014)

1 *Extraordinary sunlight absorption and one nanometer thick photovoltaics using two-dimensional monolayer materials* M Bernardi, **M Palummo**, JC Grossman Nano letters 13 (8), 3664-3670 (2013)

Conferenze internazionali/scuole/workshops :

31 Invited talks (di cui: due keynote talks, un talk allo Psik-2022, due talks a IEE-NANO2023 e IEE-NANO2021, un talk all' MRS-Fall-meeting, quattro talks al EMRS-Fall meetings, un talk al 242nd ECS meeting), **13 invited seminars/lectures** presso istituzioni nazionali e straniere, **19 orali** e 7 posters, **13 seminari di outreach** per studenti delle scuole secondarie e studenti universitari di primo livello.

Talks/seminari/lezioni su invito presso conferenze/istituzioni Nazionali e Internazionali

50 Invited Talk *Excitonic properties of 2D-layered materials by DT+GW+BSE simulations* Toulouse 2-4 October 2024
Cecam Flagship Workshop Green's function methods: the next generation

<https://www.cecam.org/workshop-details/greens-function-methods-the-next-generation-6-1286>

49 Invited Keynote Talk *Excited state properties of novel 2D/layered materials by ab-initio DFT + MBPT methods*
The meeting of the condensed matter theory Italian community Bressanone 28-30 August 2024
<https://cmtconference.it/>

48 Invited Seminar *Quasi-particles and excitons in 3D and 2D halide perovskites by ab-initio ground and excited state methods* YCU Minatomirai Campus Yohokama 4 July 2024

47 Invited Seminar *Ab-initio DFT+GW+BSE methods: excited state properties of 2D/layered materials for opto-electronic applications* Japan Women's University Tokyo 1 July 2024

46 Invited Talk *Electronic and optical properties of novel 2D/layered materials by ab-initio DFT and post-DFT methods* Nanoscience & Nanotechnology conference 3-6 June 2024 National Laboratories of Frascati (Rome), Italy
<https://agenda.infn.it/event/38963/>

45 Invited talk *"Opto-electronic properties of solar-harvesting 2D/layered materials by ab-initio methods: from TMDs to halide perovskites"* NMDC 2023 22-25 Ottobre 2023 Paestum Italy <https://ieeenmdc.org/nmdc-2023/>

44 Invited talk *"Opto-electronic properties of 2D/layered materials by DFT and post-DFT methods: from TMDs to halide perovskites"* al simposio J "Exploring the potential of bidimensional materials for energy and optoelectronics" del EMRS Fall Meeting Warsaw 18-21 Settembre 2023 <https://www.european-mrs.com/meetings/2023-fall-meeting>

43 Invited talk *"Novel materials for energy applications: insight by ab-initio ground and excited state simulations"* Nanoscience & Nanotechnology conference Maggio 29, 2023 al 1 Giugno, 2023 LNF (Frascati), Italia
<https://agenda.infn.it/event/34629/>

42 Invited lecture *"The Bethe-Salpeter equation: derivations and main physical concepts"* at the international YAMBO school "Ab initio many-body perturbation theory: from equilibrium to time-resolved spectroscopies and nonlinear optics" Roma Maggio 22-26 2023 <https://www.yambo-code.eu/2023/02/18/yambo-school-2023/>

41 Invited talk *"Excited State Properties of Low-Dimensional Materials: Insight By Ab-Initio DFT + Mbpt Simulations"* al Simposio D06" Quantum Dot Science and Technology" del 242nd ECS Meeting 9-13 october 2022
<https://www.electrochem.org/242>

40 Invited talk “*Novel materials for energy applications: insight by ab-initio ground and excited state simulations*” del Simposio “Materials for Energy” Psi-k 2022 Conference in Lausanne (Switzerland) <https://www.psik2022.net/>, Agosto 21-25 2022

39 Invited talk “*Excitons in 2D/Layered Materials by DFT plus MBPT Methods*” al Simposio “The Rise of Low Dimensionality Materials: Opportunities and Challenges from Cutting-Edge Computational Investigations” of the PACS22 conference 27-29 Giugno 2022 <https://pasc22.pasc-conference.org/program/minisymposia/>

38 Invited talk IEEE Nano 2021 online conference 28 Luglio 2021 “*Novel 2D/layered materials for energy applications: insight by ab-initio ground and excited-state methods*” <https://2021.ieeenano.org/speakers/>

37 Invited talk *Novel Materials for energy applications: insight by ab-initio ground and excited state methods* Sezione 2 - Congresso SIF 14-18 Settembre 2020 <https://www.sif.it/attivita/congresso/106>

36 Invited talk “*Role of Quasi-particle and excitons in 3D and 2D halide perovskites*” al Simposio “Theory and Computation of Halide Perovskites” (ComPer) of NanoGe online conference 8-9 Settembre 2020 (<https://www.nanoge.org/ComPer/home>)

35 Invited talk *Quasi-particle and excitons with Yambo* Max Webinar 16-Giugno 2020 <http://www.max-centre.eu/events/max-webinar-yambo-code>

34 Invited talk Symposium “2D-materials for energy applications” EMRS Spring Conference, Strasbourg (France) 25-28 May 2020 Prof. Rajeev Ahuja (rinunciato per motivi personali)

33 Invited Lecture “The Bethe-Salpeter Equation for optical properties of materials: common approximation and practical implementations” & “Hands-on Tutorial on BSE and the yambo code”, ICTP Yambo-School 2020 27-31 January 2020 <http://indico.ictp.it/event/9018/>

32 Invited seminar “*Opto-electronic properties of novel 2D materials from DFT + post-DFT methods*”, ICQMS Università di Shanghai 5 Giugno 2019

31 Invited seminar “*Novel 2D materials for opto-electronic applications: insight from refined ab-initio simulations*” Università di Paris-Sud Orsay 4 Marzo 2019 <https://www.lps.u-psud.fr/spip.php?article3257&lang=fr>

30 Keynote Invited talk “*Fundamental properties of materials from ab-initio methods*” Nanoscience and Nanodevices Frascati 18-20 Dicembre 2018 <https://agenda.infn.it/event/17167/timetable/?print=1&view=nicecompact>

29 Invited talk ‘*Novel 2D materials for opto-electronic applications: insight from parameter-free quantum mechanical methods*’ 10-12/9/18, NanoMaterials for Devices Montreal, Canada <http://nanomaterialsfordevices.ism.cnr.it/>

28 Invited talk ‘*Novel 2D materials for opto-electronic applications: insight from parameter-free quantum mechanical methods*’ 11-14/9/18 NanoInnovation2018, Rome Italy 2019 https://www.nanoinnovation.eu/2018/pdf/Programme_NanoInnovation_2018.pdf

27 Invited talk ‘*Transition Metal Dichalcogenides: a new class of 2D materials for opto-electronics*’ 2/3/18 MIFP march meeting Marino Italy <https://www.mifp.eu/images/stories/events/meetings/mifp2018/mifp-mm-2018.pdf>

26 Invited seminar ‘*2D Transition Metal Dichalcogenides: fundamental properties and applications*’ 23/2/18 Dipartimento di Chimica Università di Perugia <https://www.clhyo.org/scientific-events/seminars.html>

25 Invited talk ‘*MoS2 and its family: fundamental properties and applications*’ Osi12 26-29 Giugno 2017 Dublino <http://osi12conference.com/>

24 Invited lecture ‘*Ab-initio optical properties of materials: BSE usual approximations and practical implementation*’ Cecam school Lausanne 24-28 Aprile 2017 <https://psi-k.net/advanced-computing-excited-state-properties-solids-nanostructures-yambo-cecam-hq-24-28-april-2017/>

23 Invited talk “*Fundamental properties of Transition Metal Dichalcogenides: a novel class of 2D materials for opto-*

electronic applications" Nanoscience and Nanotechnology meeting 2016 26-29 Settembre 2016
<https://agenda.infn.it/event/11337/sessions/1330/#20160926>

22 Invited talk "*Transition Metal Dichalcogenides: 2D materials for next generation opto-electronic devices*" Fall Meeting EMRS 2016 Settembre 18-22 2016 <http://www.european-mrs.com/carbon-and-materials-energy-applications-emrs>

21 Invited lecture on *how to use the code YAMBO for GW and BSE calculations* Dept of Applied Physics Caltech Univ. Pasadena USA , 1 Agosto 2016 dal 01-08-2016 al 01-08-2016

20 Invited Lecture "*Theoretical lesson on the GW approach*" Dept of Applied Physics Caltech Pasadena USA, 4 Agosto 2016

19 Invited seminar "*Transition Metal Dichalcogenides: a novel class of 2D materials*" Dipartimento di Fisica Università di Cagliari 21/06/2016

18 Invited seminar "*Two-dimensional Transition Metal Dichalcogenides for opto-electronics*" Dept of Chemistry, Univ. Tokyo 8 Marzo 2016

17 Invited seminar "*Transition metal dichalcogenides: a novel class of two-dimensional materials for opto-electronics*" ICN2, Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia, Barcelona 21/1/2016

16 Invited Lecture "*Ab-initio optical properties of materials: BSE usual approximations and practical implementation*" & "Hands-on Tutorial on BSE calculations with the YAMBO code" 13-17 Aprile 2015 Cecam Lausanne <https://psi-k.net/psi-k-workshops-2015/>

15 Invited talk '*Light absorption and exciton radiative lifetimes in two-dimensional transition metal dichalcogenides*' Nanoscience and Nanotechnology 2015 INFN Frascati 28 Sept-2 Oct 2015 <http://www.lnf.infn.it/conference/nn2015/>

14 Invited Lecture "*Optical absorption and the Bethe-Salpeter Approach*" & "Hands-on Tutorial on Excited State Spectroscopy: GW and BSE using the Yambo code" Roma 7-9 May 2014

13 Invited talk '*Novel layered Materials for solar harvesting applications*', EMRS-2014 Fall Meeting Warsaw 15-19 Settembre 2014 <https://www.european-mrs.com/2014-fall-symposium-european-materials-research-society>

12 Invited talk '*Two-Dimensional Materials for ultrathin optoelectronic devices*', ETSF Meeting Luxemburg 1-4 Ottobre 2013 www.etsf.eu

11 Invited talk "*Novel nanoscale materials for optoelectronic and Solar Energy Harvesting applications*" NanoCenter Annual Conference 2013, Royal Rimonim Dead Sea Hotel Aprile 3-4 2013

10 Invited talk "*Monolayer materials for tunable polymer-free excitonic solar cells*", Crystal & Graphene Science Symposium-2012 Waltham, 5-6 Settembre 2012 <http://www.expressgenes.com/crystalss2012/main.html>

9 Invited talk "*Silicon and Germanium nanostructures for opto-electronic and photo-voltaic applications: ab-initio results*", Symposium Group IV Semiconductor Nanostructures and Applications "MRS Fall Meeting" Boston, 29 Novembre-3 Dicembre 2010 <https://www.mrs.org/fall2010>

8 Invited talk "*Materials for opto-electronic applications: ab-initio calculations and modelling*", "Nanoscience and Nanotechnology workshop N&N2010" INFN, Frascati 20-23 September 2010 <http://www.lnf.infn.it/conference/nn2010/>

7 Invited talk "*Quasi-particles and excitons in Silicon Nanowires: effect of Doping and Surface Termination and mixing*" OSI-VIII 7-11 September 2009 Ischia <http://osi8.roma2.infn.it/>

6 Invited talk "*Quasi-particles and excitons in Silicon Nanowires: effect of Doping and Surface Termination*" Cecam Workshop 6-8 July 2009 Lausanne www.cecamlab.org

5 Keynote Invited talk "*Electronic properties and dielectric response of semiconducting surfaces and nanostructures from ab-initio approaches*" Nanosea2008 7-10 July 2008 Monte Porzio Catone, Rome Italy

<http://nanosea.roma2.infn.it/2008/programme/programme-full.pdf>

4 Invited talk "Semiconducting nanowires: from one-particle to many-body approaches" Cecam-Psi-K Workshop 9-12 June 2008 Lyon France <https://psi-k.net/psi-k-workshops-2008/>

3 Invited talk "First-principles optical spectra of semiconducting surfaces and nanowires: the role of the excitonic effects", 12th Nanoquanta Workshop 18-22 September (2007), Aussois France <http://etsf.grenoble.cnrs.fr/events/nanoquanta-workshop07/>

2 Invited talk "Semiconductor nanowires: ab-initio electronic and optical properties beyond the one-particle approach", OSI 2005, Aalborg, Denmark 6-10 June, (2005) <https://vbn.aau.dk/en/activities/conference-on-optics-of-surfaces-and-interfaces-osi-vi-2>

1 Invited talk "First-principles optical spectra of semiconductor surfaces: from one-particle to many-body approach", Epioptics-7 20-26 July 2002 <http://www.ccsem.infn.it/ccsem2002/Cricenti2002.html>

Orali (20):

20 Talk "Electronic and optical properties of novel 2D/layered materials by parameter-free quantum-mechanical ground and excited state" MRS Fall Meeting 2024 Boston 1-6 Dicembre 2024

19 Talk "Strongly-bound excitons in Organic-inorganic 2D Perovskites: a DFT + post-DFT study" Materials.it 2018 Bologna, 22-28 October 2018

18 Talk "Strongly bound excitons in organic-inorganic 2d perovskites : a dft+ mbpt study" Symposium A3 IMRC 2018 Cancun Mexico August 2018

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

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

15 Talk "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 June 2009 , France

14 Talk "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

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

12. Talk "Dielectric Response of clean and covered surfaces from first-principles approaches", Congresso INFM Genova 8-10 June 2004

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

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

9 Talk "Calculations of the spectroscopic properties of real materials", Workshop "Modelling through Numerical Simulations" Roma, 'Tor Vergata' 17 - 18 January 2000

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

7 Talk "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, December 21-22 1998

- 6 **Talk** "*Calculation of the dielectric function of Si beyond the Local Density Approximation*", II congresso Nazionale dell'INFM, Rimini 25-30 June 1998
- 5 **Talk** "*Electronic properties of semiconductors and insulators: computing the behaviour of complex systems*", Lione Francia, September 1994
- 4 **Talk** "*First-principles calculation of the self-energy corrections to the bandstructure of cubic GaN*", XVII Annual Meeting, Advances in Surface and Interface Trieste
- 3 **Talk** "*Self energy corrections for excited states and localized states*", European Community Workshop, Parigi, Francia, Settembre 1992
- 2 **Talk** "*Calcolo ab-initio con pseudopotenziali a norma conservata delle proprietà di stato fondamentale e di stato eccitato del GaN*", Wide-Band-Gap Semiconductors" Trieste, June 1992
- 1 **Talk** "*Studio dei livelli VUV di eccitazione del Cr³⁺ in un cristallo di Na₃In₂Li₃F₁₂*", Congresso SIF Trento 8-13 October 1990

Seminari di terza missione (13):

15. "La scienza dei materiali all' università di Roma Tor Vergata" Giornata Orientamento Liceo F. D'Assisi Roma 11-10-2024
- 14 "L' invisibile bellezza della materia alla scala atomica: dal sogno di Feynman ai nuovi materiali del futuro, Dipartimento di Fisica Roma Tor Vergata 17-5-2024
13. "From physics to materials science: The extraordinary world of materials" Euromath & Eurosciences Università di Roma Tor Vergata 14/3/2024
12. "La scienza dei materiali all' università di Roma Tor Vergata" Evento organizzato dal Liceo M.T. Cicerone Frascati 24/2/2024
11. "La scienza dei materiali all' università di Roma Tor Vergata" Evento iniziale Lab2go 2023-2024 18/12/2023
10. "Lo straordinario mondo dei materiali", 24 Settembre 2021 durante l'evento "Notte Europea dei Ricercatori" (zoom platform)
9. "La scienza dei Materiali" Liceo Scientifico Touschek 15/12/2020 Grottaferrata (zoom platform)
8. "Fisica della materia: dal macro al nanomondo" 9/4/19 Pizza Seminars Univ. Tor Vergata
7. "Alla scoperta del nanomondo" 27/02/2019 Scienza Orienta Univ. Tor Vergata
6. "La scienza dei materiali" Liceo Classico-Linguistico Cicerone 31/1/2019 Frascati
5. "La scienza dei materiali" Liceo Scientifico Cartesio 10/3/2017 Olevano Romano
4. "La scienza dei materiali" Liceo Classico Seneca 9/2/2016 Roma
3. "La scienza dei materiali" Liceo Scientifico Touschek 27/10/2015 Grottaferrata
2. "La scienza dei materiali" Liceo Scientifico Pietro Bono 10/12/2015 Alatri
1. "La scienza dei materiali" Liceo Classico Plauto 7/5/2015 Roma

Attività editoriali e di Referaggio:

- Guest Editor del focus intitolato 'Focus on Photocatalytic water splitting' <https://iopscience.iop.org/collections/nano-231020-395> Nanotechnology IOP-Science
- Guest Editor di un numero speciale del Journal of Physics: Condensed Matter "Focus on Excitonic Properties of Two-Dimensional Materials" 2023 <https://iopscience.iop.org/collections/jpcm-230901-338>
- Guest Editor di un numero speciale di Frontiers in Chemistry 2022 Studio teorico di materiali bidimensionali per fotocatalisi e fotovoltaico <https://www.frontiersin.org/research-topics/32734/theoretical-study-of-two-dimensional-materials-for-photocatalysis-and-photovoltaics/magazine#articles>
- Guest editor del numero speciale (MPDI) 2021 Optoelectronic Properties and Applications of Nanomaterials https://www.mdpi.com/journal/nanomaterials/special_issues/Nano_Optoe_App
- Guest Editor del volume Current opinion in Green and Sustainable Chemistry Elsevier (2019)
- Membro del comitato editoriale di Scientific Reports (gruppo editoriale Nature)
- Referee per le riviste APS, ACS, RCS e IOP ed Elsevier;

- Revisore di progetti: 2 progetti americani NSF, 1 progetto Estone e 2 progetti Austriaci della Fondazione scientifica, 1 progetto dell'Agenzia nazionale francese, 2 progetti tedeschi DFG, vari progetti ISCRA-B Cineca e 1 progetto PRACE, 1 progetto ERC consolidator

Riconoscimenti professionali:

- selezionata nella lista dei World's top 2% scientists Stanford University 2023 <https://eceb.com/2023/10/04/stanford-university-names-worlds-top-2-scientists-2023/>
- Abilitazione scientifica nazionale a Professore di ruolo di prima fascia, domanda n. 62439, (2018, fino al 2028) - Bando D.D. 1532/2016, 02/B2 Fisica teorica della materia
- Vincitrice del Premio MIUR "Finanziamento delle attività di ricerca di base" come Professore Associato (2017)
- Vincitrice come PI di un progetto europeo PRACE-H2020 (XVI bando)
- Vincitrice di una borsa di studio Endeavour del governo australiano (<https://endeavour.education.gov.au>), per svolgere ricerca su materiali 2D in Australia (4 mesi, 2017). Rifiutata per motivi personali
- Visiting scientist presso il Laboratoire Physiques des Interactions Ioniques et Moléculaires (PIIM) dell'Università di Aix-en-Provence/Marsiglia, Gruppo Dr. Elena Cannuccia 2-16 settembre 2023 (finanziato da un grant dell'istituzione ospitante)
- Visiting scientist presso il Gruppo CNRS-Orsay Dr. A. Zobelli Paris Sud 11-23 marzo 2023 (finanziato dal gruppo ospitante)
- Vincitrice di un grant CNRS per un periodo di ricerca presso Orsay-Paris Sud 15 giugno-3 luglio 2020 (non utilizzato causa covid)
- Visiting scientist presso il Gruppo ICQMS Prof. W. Ren Shanghai University, 2-8 giugno 2019 (finanziato dal gruppo ospitante)
- Visiting scientist presso il Gruppo CNRS-Orsay Dr. A. Zobelli Paris Sud 4-8 marzo 2019 (finanziato dal gruppo ospitante)
- Visiting scientist presso il Dipartimento di Fisica Applicata Caltech Univ. Gruppo Prof. M. Bernardi (9/7/2017-5/8/2017) (finanziato dal gruppo ospitante)
- Visiting scientist presso il Dipartimento di Fisica Applicata del Caltech Institute of Technology Group. Prof. M. Bernardi (13/7/2016-13/8/2016) (finanziato dal gruppo ospitante)
- Visiting scientist presso il Dip. di Chimica Univ. del Tokyo Group Prof. K. Yamashita (1-11 marzo 2016, finanziato dal gruppo ospitante)
- Visiting scientist presso il Dipartimento di Scienza dei Materiali del MIT, Gruppo Prof. J.C. Grossman: Estate 2012 (contratto ufficiale del MIT di 3 mesi), gennaio 2013 (finanziato dal gruppo ospitante), luglio 2014 (finanziato dal gruppo ospitante), marzo 2015 (finanziato dal gruppo ospitante), luglio 2018 (finanziato dal gruppo ospitante)).
- Membro dello Psi-k working group C6 (Nanoscale structures) da Giugno 2024
- Referee internazionale della tesi di dottorato e membro della giuria esame finale della Dr. Elisa Serrano Université Paris Saclay France, 19 Novembre 2024
- Opponent internazionale all' esame di dottorato e membro della giuria del Dr. Mikkel Sauer, Dipartimento di Materiali e Produzione dell'Università di Aalborg 9 ottobre 2023
- Membro del comitato per l'abilitazione a dirigente di ricerca (HDR) del Dr. George (Yorgos) Volonakis Rennes 22 maggio 2023
- Membro della giuria per la difesa della tesi di dottorato del Dr. A.R. Kshirsagar Università di Grenoble-Alpi Francia, 24 marzo 2021
- Opponent internazionale della tesi di dottorato e membro della giuria per la discussione della tesi del Dr. Arnaud Lorin, Ecole Polytechnique Palaiseau Francia, 17 dicembre 2020
- Referee esterno della tesi di Dottorato e membro della commissione esame finale della Dott.ssa Elisa Serrano , Université Paris Saclay France, 19 November 2024
- Referee esterno della tesi di dottorato del Dott. Felice Conte, Università Federico II di Napoli, ottobre 2021
- Referee esterno della tesi di Dottorato della Dott.ssa Paola Mocci, Università di Cagliari 2019
- Referee esterno della tesi di Dottorato del Dott. M. Atambo Università di Modena e Reggio 2018
- Opponent internazionale e Membro della commissione per l'esame del dottorato presso la Facoltà di Scienze dell'Università di Lund, Svezia Candidato E. Bostrom 4-6 giugno 2017
- Referee esterno della tesi di dottorato del Dott. Roberto Cardia, Università di Cagliari 2016
- Opponent internazionale e Membro della Commissione Esterna di Dottorato dell'Esame Finale di Dottorato del Dr. Leonardo Espinosa, San Sebastian Spagna 22/10/2013
- Referee internazionale della tesi di dottorato del Dr. Matteo Govoni 2013 Ecole Polytechnique, Palaiseau Francia (2012)
- Relatore esterno tesi di dottorato Dott. F. Iori, Univ. Modena e Reggio (2008)
- Membro del "Collegio dei docenti del Dottorato di Ricerca in Fisica" presso UTOV 30 settembre 2011- 31 dicembre 2013
- Membro del "Collegio dei docenti del Dottorato di Ricerca in Fisica" presso UTOV dal 2017 ad oggi

- Membro della Commissione di selezione degli studenti del Corso di Laurea e Laurea Magistrale in Fisica dell'UTOV per un "Percorso di Eccellenza" dal 2020 ad oggi
- Membro della commissione esame finale del Dottorato di Ricerca in "Fisica e Nanoscienze" Modena Anno 2021 (28 ott 2021)

- Membro della commissione esame finale di Dottorato di Ricerca Dottorato di Ricerca in "Fisica e Nanoscienze" Modena Anno 2020 (date esami 13/01/2020 e 4/9/2020)
- Membro della commissione esame finale di Dottorato di Ricerca Dottorato di Ricerca in "Fisica e Nanoscienze" Modena, Anno 2019 (date esami 18/2/19 e 29/8/19)
- Membro della commissione dell'esame finale del corso di Dottorato di Ricerca "in Fisica e Nanoscienze" Univ. Modena e Reggio Emilia, 18/2/2018
- Membro della commissione degli esami finali del corso di Dottorato di Ricerca "in Fisica e Nanoscienze" Univ. Modena e Reggio Emilia, 3/2/2015
- Membro della commissione per l'esame di ammissione al corso di dottorato "Modelli matematici per ingegneria, elettromagnetismo e nanoscienze" Univ. Roma La Sapienza 6/10/2014
- Membro di una commissione nazionale per la selezione di una RTT presso il Dipartimento di Ingegneria dell'Università di Modena e Reggio (02/B2 Decreto Rettoriale 378/2024 del 29/04/2024.
- Membro di una commissione nazionale per la selezione di una RTDA presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Padova (02/B2 Decreto Rettoriale n. 4530 del 28 ottobre 2022)
- Membro di una commissione nazionale per la selezione di un RTDB presso l'Università di Milano (02/B2 G.U. n. 17 del 01/03/2022) n. 4956 (2022)
- Membro di una commissione nazionale per la selezione di una RTDA presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Milano (02/B2 n 4042 G.U. n. 51 del 28/06/2019)
- Membro di una commissione nazionale per la selezione di due RTDB presso il Politecnico di Milano (02/B1 n. 2018/RTDB_PS_FIS14) (2019)
- Membro di una commissione nazionale per la selezione di un RTDB presso l'Università di Milano (02/B2 D.R. 1875/2018 n. 3761 (2018)

- Ricerca relativa all'isolante eccitonico Wte2 pubblicata sul sito <https://www.nano.cnr.it/hunting-for-excitonic-insulators/>
- Ricerca relativa all'isolante eccitonico MoS2-T' pubblicata sul sito <https://www.nano.cnr.it/excitonic-and-topological-order-in-t-mos2/>
- Ricerca relativa agli eccitoni nell'anatase bulk e nei nanocristalli (Nat Comm 2017) pubblicata <https://phys.org/news/2017-04-absorption-titanium-diossido.html>, <http://www.azonano.com/article.aspx?ArticleID=4471> <https://idw-online.de/en/news672925>
- Ricerca relativa alla fotovoltaica ultrasottile basata su materiali monostrato, pubblicata su Nano Letters 2013, presente sulla homepage del MIT (<http://web.mit.edu/newsoc/2013/thinner-solar-pan-0626.html>) materiali online (<http://www.materials360online.com/newsDetails/40780>), notizie sull'ottica (<http://optics.org/news/4/7/10>) e altri siti Web come notizie sulla fotonica; sito web sul cambiamento climatico; Breaking Energy Intervista apparsa su Hungton Post del 28 giugno 2013 (<http://www.hungtonpost.it>)
- Ricerca sui nanofili Si/Ge per applicazioni fotovoltaiche pubblicata su (<http://www.lobbyinnovazione.it>)
- Varie pubblicazioni selezionate per il Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology

Organizzazione and Management:

- 11) Co-chair di due sessioni scientifiche alla conferenza "Nanoscience & Nanotechnology" at INFN-LFN Frascati 15-19 October 2019 <https://agenda.infn.it/event/19925/timetable/#20191015>

- 10) Co-chair di un Symposio scientifico alla conferenza internazionale IMRC2018 (Cancun 2018) (<http://www.mrs-mexico.org.mx/imrc2018/symposium-A4>)

- 9) Organizzatrice locale del workshop internazionale Psi-k "OPTTEL2D" su 2D materials (Rome 18-19 Dec 2017) <https://psi-k.net/scientific-report-psi-k-workshop-2d-layered-materials-opto-electronics-theoretical-computational-perspective/>

- 8) Co-organizzatrice locale del workshop "ETSF Collaboration Team on Electron-Vibrational Coupling" Roma 15-16 January 2015, (www.yambo-code.org)

- 7) Co-organizzatrice del workshop internazionale "40 Years of the GW Approximation for the Electronic Self Energy: Achievements and Challenges" . (GW2005), Bad Honnef, Germany, 2005 www.etsf.eu)
- 6) Membro del comitato organizzatore e organizzatore locale della conferenza internazionale "Theory and Modeling of Electronic Excitations in Nanoscience", Acquafredda di Maratea, Italy, (2004, www.etsf.eu)
- 5) Membro del comitato organizzatore della conferenza internazionale "Ab initio Electron-Excitations Theory: Towards systems of Biological Interest" BIOEXC, San Sebastian, Spain, (2003, www.etsf.eu)
- 4) Membro del comitato organizzatore della conferenza internazionale "Ab initio Theoretical Approaches to the Electronic Structure and Optical Spectra of Materials" Lyon, France, CECAM (2002, www.etsf.eu)
- 3) Membro del comitato organizzatore di **quattro** workshops internazionali sui nanowires
 NW2010 (<http://www.iesl.forth.gr/conferences/nw2010/default.html>),
 NW2011 (<http://www.iesl.forth.gr/conferences/nw2011/default.html>),
 NW2012 (<http://www.pdi-berlin.de/nanowires-2012>) ;
 CECAM 2013 (<https://www.cecamlab.eu/workshop-details/598>)
- 2) Co-organizzatrice di **sette** scuole internazionali della teoria e utilizzo del codice many-body Yambo (Yambo school 2023 come organizzatore locale), Yambo school 2022 ICTP/Max, Yambo school 2021 Cecam/Max online, Yambo school 2020 ICTP/Psi-k Max, Yambo School Psik/Cecam 2017, Yambo School Psik/Cecam 2015, Yambo school Psi-k/Cast Cineca 2014, see www.yambo-code.eu.
- 1) Co-organizzatrice di un simposio “ Optical Properties of materials” alla conferenza internazionale ICSFS16 1-6 Luglio 2012 Genova, <http://www.icsfs16.eu/>

Dal 2001, ho partecipato alla stesura di numerosi progetti scientifici nazionali ed europei e bilaterali (e svolto/coordinato attività di ricerca in quelli finanziati), sia come membro del nodo di Roma sia come Principal Investigator (PI).
 In particolare, negli ultimi 15 anni:

35 Collaboratore scientifico del progetto “PRIN2022 IRIDE”, secondo la proposta progettuale approvata dal MUR.

34. EcoE-III HORIZON-EUROHPC-JU-2023-COE-01 (Centres of Excellence For Exascale HPC Applications)
 Budget totale : € 5.998.787,26 (finanziato, Team representative del WP2: Materials)

33. Spoke 6 - Multiscale Modelling & Engineering Applications Project “ Multiscale simulation of advanced nanoelectronic and optoelectronic devices based on novel materials” (PI nodo locale, finanziato un assegno post-doc biennale)

32. HORIZON-MSCA-2022-DN-01-01 -- Doctoral Network “Time Resolved sImulations in QuantuM MatERials (TIMES)” data di inizio 3/2024 (finanziato, WP leader)

31 Progetto Prin-pnrr “Light convErsion in hybrid orGanic/2D dichalcOgenides heterostructureS (LEGOS)”
 Prot. P20225PKJ9 , (PI di un nodo locale, ben valutato 94/100 non finanziato, primo escluso)

30 Progetto bilaterale “Computational lab for nonequilibrium physics: modelling ultrafast dynamics of excited states in advanced materials” n. PGR11276. Italy-USA (membro, PI Davide Sangalli, non finanziato)

29 Progetto PriN2022 “Hybrid pErovskite nanowiRes for OptoElectronic applicationS (HEROES)” “ (PI di un nodo locale, n. Prot. 2022WL9MLA, (ben valutato 93/100 non finanziato, primo escluso)

28. Progetto Collaborativo Giappone -Italia NEDO “International Joint Research and Development of Lead-Free Alloyed Tin Perovskite Tandem Solar Cells “(2021–2024), PI di uno dei nodi italiani (finanziato)

27. PRIN2020 ARTificial CHarge-confining landscapes in Two-dimEnsional heterostruCTUres by stRain-field engineeriNG - ARCHITECTURING n. 2020Z8SNXZ_004) (PI di un nodo locale, ben valutato 90.3/100, non finanziato)

26. Un Progetto Nato *Ultralight, wearable solar cells as portable electricity source* (membro, finanziato, budget totale €273000)
25. Un Progetto della Regione Lazio n. A0375-2020-36676 “High mobility 2D polimers” 2021-2023 (PI nodo locale, budget totale 150 keuro)
24. Un Progetto INFN “TIME2QUEST” iniziativa specifica gruppo 4 (membro, finanziato)
<https://web.infn.it/CSN4/index.php/it/17-esperimenti/222-time2quest-team>
23. Un Progetto ANR-France “Bonaspes” 2020-2024 (Partner’s scientific leader) (budget 480 keuro)
<https://anr.fr/Project-ANR-19-CE30-0007>
22. Un Progetto “beyond-borders” dell’ Università di Roma Tor Vergata (co-PI, finanziato 5keuro)
21. Un Progetto “Mission sustainability” dell’Università di Roma Tor Vergata 3/2018-8/2019(PI, finanziato 21 keuro)
20. Un Progetto “Uncovering excellence” dell’ Università di Roma Tor Vergata (membro, non finanziato)
19. Un Progetto di ricerca INFN NEMESYS dell’ “Iniziativa Specifica-group VI” (membro, finanziato dal 2017-2020)
18. Due progetti bilaterali MISTI <https://misti.mit.edu/> 2016 e 2017 (PI di uno dei due nodi, non finanziati)
17. Progetto PRIN2017 (PI di uno dei due nodi ben valutato, non finanziato n. 2020Z8SNXZ_004)
16. PRIN2015 “2D Transition Metal Dichalcogenides: an experimental and theoretical route towards next generation ultra-thin opto-electronics (PI nazionale, ben valutato 12/15 non finanziato. Protocollo. N. 20157JLHLX)
15. PRIN2012 (PI di un nodo locale, ben valutato, non finanziato. Protocollo. N. 12CZYB3S_00)
- 14 Un progetto bilaterale Italia/USA n. PGR01381 (co-PI con G. Cicero, PI: J. Grossman, non finanziato)
13. Due progetti bilaterali “Galileo” Italia/Francia 2013 and 2015 (co-PI, non finanziati)
12. Un Progetto Samsung GRO 2015 con Prof. M. Bernardi (CIT,USA) (PI di uno dei 2 nodi, non finanziato)
11. 1 Psi-k grant per ottenere fondi per l’ organizzazione di un workshop internazionale “2dopt” Rome 2017 (PI, finanziato 3k€)
10. 1 Psi-k/Max-Center & ICTP grants per l’organizzazione della scuola Yambo 2020 (co-PI, 9.2k€ finanziato)
9. 1 Psi-k grant per l’organizzazione di un “Hands-on Tutorial on Excited State Spectroscopy: GW and BSE using the Yambo code”, Rome, Italy, 7-9 May 2014 (co-PI, finanziato 6k€)
8. 1 CECAM & ESF/Psik grant per l’organizzazione di un workshop “Theory, simulation and modeling of SiGe nanostructures: from nanoelectronics to renewable energy”, 3-6 Giugno 2013, Cecam Lausanne (co PI, finanziato 18 k€)
7. Progetto Europeo H2020-MSCA-RISE-2018 DiSeTCom n. 823728 (membro, finanziato 690k€)
6. Progetto Europeo H2020-MSCA-RISE-2017 OPTMAT (membro, non finanziato)
5. Progetto Europeo H2020-MSCA-RISE-2014 COEXAN (membro, finanziato 1ML€)
4. Progetto Europeo H2020-FETPROACT-2016-20 n. 73204 (membro, finanziato)
3. Progetto Europeo FP7-NMP-2011 n. 280723 ” *White Light Emitting hybrid ZnO Nanostructures* ” (2011) (PI di un nodo locale, non finanziato, ben valutato primo fra gli esclusi)

2. Progetto Europeo FP-NMP.2001.4.05 “*Nanoscale simulations for Photovoltaics*” project (2011) (membro, non finanziato)
1. un FIRB n. RBFR129YPH004 (2010) (membro, non finanziato , ben valutato primo fra gli esclusi)

L'elenco degli altri progetti finanziati in anni antecedenti al 2010 alla cui stesura ho partecipato e alla cui attività di ricerca ho contribuito sono: PRIN2002 (membro), PRIN2005028257_004 (membro), PRIN20079XA4HW_004 (membro), INNESCO 2003-2005 (membro), Eu-Nanophase HPRN-CT-2000-00167 (membro), Eu-Nanoquanta NMP4 -CT-2004-500198 (membro), Eu-I3-ETSFn. RI-211956 (membro); 4 sovvenzioni FSE/Psi-k per organizzare le conferenze ETSF (co-organizzatore)

Negli ultimi 15 anni sono stata PI (7) o co-PI/membro dello staff (8) di diversi progetti nazionali ed europei di supercalcolo HPC (incluso vari PRACE) sulla base di una selezione competitiva e sottoposta a peer review (1ML di “core-hours” sono equivalenti a circa 6,25keuro, come indicato dal Cineca)

7) PI di un Progetto Iscra-B Strano *Strain modulation of the electronic and optical properties of vdW hetero-structures* 200k core-hours m100 (2022)

6) PI di un Progetto Iscra-B Dieci *2D Direct and indirect excitons in chalcogen-based 2D materials: a DFT+MBPT study* n. HP10BKKCCV Budget (standard hours): 720.000 su m100 (2020)

5) PI di un Progetto PRACE-H2020 optel2d *Opto-electronic properties of 2D Transition Metal Dichalcogenides with DFT and post- DFT simulations* (2018) (49ML core-hours on Marconi-knl equivalente a 306 keuro).

4) PI di un Progetto ISCRA-B EXSEM2D *Excitons in 2D semiconducting materials by refined ab-initio methods* (10ML core-hours su Marconi, (2019) equivalente a 62.5 keuro)

3) PI di un Progetto ISCRA-B NWPOLY *Polytypism in Group III-V and IV nanowires : an ab-initio perspective* (2015) (650k core-hours on Fermi)

2) PI di un Progetto ISCRA-B Ex-natio n. HP10BUJ6VJ *Ab-initio investigation of EXcited-state properties of NAnostructured TIO2-based materials* (2011) (650k core-hours on fermi)

1) PI di un Progetto ISCRA-B OPSANN n. HP10B2DDQJ *A New Perspective in Semiconductor Nanoscience: Optoelectronic Properties of SiGe Alloyed Nanocrystals and Nanowires* (136k core-hours on SP62010)

10) Co-PI di un Progetto IscraB P2DFET n. HP10BAE9TU Budget (standard hours):444800 leonardo

9) Co-PI di un Progetto IscraB “*Symmetry and Optoelectronics in 2D Hybrid Organic-Inorganic Halide Perovskites. A combined Density Functional and Many-Body Perturbation Theory based analysis*” (50000 node/hours m100)

8) Co-PI di un Progetto PRACE-H2020 Extend” *EXcitonic instability in two dimensional tungSTEN Ditelluride*” 2019 (45ML core-hours su Marconi2)

7) Co-PI di un Progetto Iscra-B n. HP10BEBZU4 *PiBifree* (1.5ML cpu-hours on marconi2) (2019)

6) Co-PI di un Progetto Iscra-B 2D-OIHPs n. HP10BGUJ6X *Insights in the 2D Organic-Inorganic Hybrid Perovskites (OIHPs) and their heterocomposites. A first principles analysis* (4ML core-hours on Marconi, 2018)

5) Membro di un Progetto Iscra-B n. hp10bbznp SPERE *Single Photon emission from point defects in 2D materials* 1.5 ML cpu-hours on Marconi2 (2020)

4) Membro di un Progetto PRACE *Ancient_Rome –Study of mANy body exCItations in dEfective titaNium dioxide maTeRials by ab-initiO Methods* 2019 (30 ML core-hours su Marconi2)

3) Membro di un Progetto PRACE-DECI-7-FP7 7 2011 ”*DIIVIB: Effect of electron-phonon coupling on the electronic structure of small diamond cages*”

1) Membro di un Progetto PRACE-DECI-6- FP7 2010 ”*The optical properties of group IV semiconductor nanocrystals an ab initio many body perturbation approach*”

1) Membro di un Progetto ISCRA-B n. HP10B4SQA4 ”*Atomistic simulations of nanostructured silicon interfaces*” 2013

Altri progetti di supercalcolo vinti:

- PI di un Progetto Iscra-C GeSOPT n. HP10C8NU7N “*Germanium Disulphide: an ab-initio study of the electronic and optical properties by DFT+MBPT methods*” (2020)
- PI di un Progetto ISCRA-C n. HP10COI5O6 2DASP “*Optoelectronic features of 2D AsP layered structures up to the*

inclusion of many-body effects” 2019

- PI di un Progetto ISCRA-C n.HP10CLLJPF EXCMOIRE *Exciton modulation by Moire' patterning in bilayer boron nitride* (2018)
- PI di un Progetto ISCRA-C n.HP10CP60YK LESiNW *Light-emission in Silicon Nanowires* (2017)
- PI di un Progetto ISCRA-C n.HP10C7TJIP OPFLOW *Optical properties of porphyrin thin films and low dimensional structures* (2015)
- PI di un Progetto ISCRA-C n.HP10CXGIQB T2DTMD *”Radiative lifetimes of two-dimensional Transition Metal Dichalcogenides ”* (2014)
- PI di un Progetto ISCRA-C n. HP10C80NSA TAPOG *”Tautomeric forms of Porphyrines on Graphite: energetics, electronic and optical properties”* (2013)
- PI di un Progetto ISCRA-C n. HP10CMAA6K TEXCAB *”Tunable Polymer-Free Excitonic Solar Cells from Ab-Initio Calculations”* (2012)
- Membro dello Staff di altri 22 progetti ISCRA-C
- PI/membro dei teams scientifici di 10 ETSF collaborative and/or training proposals www.etsf.eu
- Ho ospitato 2 ricercatori europei (M.Voros 2011 and F. Iori 2010) nell’ ambito del HPC-Europa2 Transnational Access Programme

Organizzazione/compiti nel Dipartimento:

- Dal 3 marzo 2023 sono stata eletta coordinatrice dei Corsi di Laurea Triennale e Magistrale in Scienza dei Materiali dell' Università degli Studi di Roma Tor Vergata
- Sono stata membro dal 2017 al 2019 della commissione didattica ristretta del corso di laurea in Fisica dell' Università degli Studi di Roma Tor Vergata
- Sono membro della commissione di valutazione degli studenti per i “Percorsi di Eccellenza” dei Corsi di Laurea Triennale e Magistrale di Fisica dell' Università degli Studi di Roma Tor Vergata
- Sono membro della commissione didattica ristretta del corso di laurea in Scienza dei Materiali dell' Università degli Studi di Roma Tor Vergata
- Membro del “Collegio dei docenti del Dottorato di Ricerca in Fisica” a TV 2011-2013 e dal 01-03-2017 ad oggi
- Sono responsabile per l’area di Scienza e Tecnologia dei Materiali della pagina web del corso di laurea e dei canali social (facebook,Instagram,linkedin,tiktok)
- Sono responsabile dell’organizzazione dei seminari di Scienza dei Materiali presso il Dipartimento di Fisica dell' Università degli Studi di Roma Tor Vergata

Esperienza didattica:

Tesi di laurea triennale, laurea magistrale e dottorato:

- Simone Grillo Dottorando in Fisica 2021/2024, (co-supervisore)
- Andrea Sette Laurea Magistrale in Scienza dei Materiali “Uno studio ab initio: proprietà elettroniche e ottiche dei carbeni N-eterociclici” 26 maggio 2022 (relatore)
- Stefano Lista “Simulazioni ab-initio di un nuovo polimero bidimensionale con coni di Dirac a dispersione lineare” Tesi di laurea in Fisica Univ. Tor Vergata 18 dicembre 2021, (relatore)
- Alessandro Moreci “Simulazioni quantistiche da principi primi di nitrato di carbonio grafittico puro e drogato” Tesi di laurea triennale in Fisica, Univ. Tor Vergata 26 febbraio 2021, (relatore)
- Sara Postorino (Tesi di Dottorato in Fisica Ciclo XXXIV Titolo: Electronic and Excitonic Properties of Two Dimensional Chalcogen-based Materials by Ab-initio Ground and Excited State Methods, 2018/2022, (supervisore)
- Simone Brozzesi Tesi Magistrale in Scienza dei Materiali (Univ. Tor Vergata) A.A: 2019-2020 (co-relatore)
- Alessandro Graziani Tesi Magistrale in Fisica (Univ. Tor Vergata) A.A. 2018-2019 (co-relatore)
- Simone Grillo Laurea Triennale in Fisica (Univ. Tor Vergata) A.A. 2017-2018 (co-relatore)
- Sara Postorino Tesi Magistrale in Fisica (Univ. Tor Vergata) A.A. 2017-2018 (relatore)
- Riccardo De Gennaro Tesi Magistrale in Fisica (Univ. Tor Vergata) A.A. 2016-2017 (relatore)
- Antonio D'Auria Tesi di Laurea Univ. Tor Vergata A.A. 2015-2016 (relatore)
- Giovanni Bellucci Laurea Magistrale in Scienza dei Materiali Univ. Tor Vergata A.A. 2015-2016 (relatore)
- Emanuele Tomo Laurea Triennale in Fisica (Univ. Tor Vergata) A.A. 2011-2012 (relatore)
- Paolo Bagalà Tesi Magistrale in Fisica (Univ. Tor Vergata) A.A. 2008-2009 (co-relatore)
- Michele Amato Tesi di Dottorato in Nanoscienze (Università di Modena e Reggio) A.A. 2009-2010 (co-supervisore)
- Mauro Bruno Tesi di Dottorato in Fisica Univ. di Tor Vergata A.A. 2007-2008 (co-supervisore)

Dal 2023 Docente dell'insegnamento Materiali 2D (Laurea Magistrale in Scienza dei Materiali) (da 6 cfu, di cui 3 in codocenza)

Dal 2010 Docente dell'insegnamento di Struttura della Materia 2 (Laurea Magistrale in Fisica, UTOV) da 6 cfu

Dal 2012 al 2022 Docente dell'insegnamento Teoria dello Stato Solido e Modelli Molecolari, (Laurea Magistrale in Scienza dei Materiali, 4 cfu, UTOV)

Dal 2012 al 2021 Ciclo di Lezioni del corso "Teoria Quantistica dei Solidi" - Prof. O. Pulci, (per un totale di circa 16 ore frontali Laurea Magistrale in Fisica, UTOV)

AA. 2011-2013, Ciclo di Lezioni "Introduzione alla Teoria delle Perturbazioni a Molti Corpi", corsi di Dottorato in Fisica, UTOV (6 ore)

AA. 2004-2005, Docente di Metodi Matematici per la Scienza dei Materiali, (Laurea Triennale in Scienza dei Materiali, 6 cfu, UTOV)

AA. 2005-2006, Docente di Metodi Matematici per la Scienza dei Materiali, (Laurea Triennale in Scienza dei Materiali, 6 cfu, UTOV)

AA. 2002-2011 Codocente dell'insegnamento di Fisica Atomica e Molecolare (Prof. Fanfoni, Corso di Laurea in Scienza dei Materiali, UTOV) e di Struttura della Materia (Corso di laurea triennale in Fisica, UTOV) per un totale di circa 20 ore frontali

AA. 2000-2001 e 2001-2002, Codocente dell'insegnamento di Fisica Classica per Biologi (Laurea Triennale UTOV) per un totale di circa 16 ore frontali

Per ulteriori informazioni consultare la pagina web personale <https://www.fisica.uniroma2.it/elenco-telefonico/palummo/>
per l'elenco completo delle pubblicazioni consultare google-scholar o ISI-WEB

Lista completa delle pubblicazioni scientifiche

158) Tellurene Polymorphs: A New Frontier for Solar Harvesting with Strong Exciton Anisotropy and High Optical Absorbance. S. Grillo, S. Postorino, M. Palummo, O. Pulci *Advanced Energy Materials*
<https://doi.org/10.1002/aenm.202400674> (IF=24)

157) "Electronic Transport Modulation in Ultra-strained Silicon Nanowire Devices"
Bartmann, Maximilian; Glassner, Sebastian; Sistani, Masar; Rurali, Riccardo; **Palummo, Maurizia**; Cartoixa, Xavier; Smoliner, Jürgen; Lugstein, Alois submitted to *ACS Applied Materials & Interfaces* 2024 (IF=9.5)

156) "Layer selective strain engineering in van der Waals heterostructures: Giant photoluminescence enhancement in InSe/strained-MS₂ (M=Mo,W) heterostructures" Elena Blundo, Marzia Cuccu Federico Tuzi Michele Re Fiorentin, Giorgio Pettinari, Atanu Patra, Salvatore Cianci Zakhar Kudrynskyi, Marco Felici, Takashi Taniguchi, Kenji Watanabe, Amalia Patanè, **Maurizia Palummo** and Antonio Polimeni, submitted to *Nature Materials* (2024) (IF=41.2)

155) "On-surface Molecular Recognition driven by Chalcogen Bonding"
L. Camilli, C. Hogan, D. Romito, L. Persichetti, A. Caporale, **M. Palummo**, M. Di Giovannantonio, D. Bonifazi *JACS* Au (2024) (IF=8)

154) "Mechanical properties of bilayer WS₂ and Graphene-WS₂ Hybrid composites by molecular dynamics simulations"
Fan Wu, Huifeng Tan, **Maurizia Palummo** and Luca Camilli *J. Phys.: Condens. Matter* **36** 225301 (2024) (IF=2.7)

153) "Strain tunable interlayer and intralayer excitons in vertically stacked MoSe₂/WSe₂ heterobilayers" LL Li, R Gillen, **M. Palummo**, MV Milošević, FM Peeters *Applied Physics Letters* 123 (3) (2023) (IF=3.97)

152) Exciton ground state fine structure and excited states landscape in layered halide perovskites from combined BSE simulations and symmetry analysis C Quarti, G Giorgi, C Katan, J Even, **M Palummo** *Advanced Optical Materials* (2023) (IF=10.05)

151) Exploring the range of applicability of anisotropic optical detection in axially coordinated supramolecular structures
F Goto, A Calloni, I Majumdar, R Yivlialin, C Filoni, C Hogan, **M Palummo**, et al. *Inorganica Chimica Acta*, 121612 (2023) (IF=3.11)

- 150) Excitonic absorption signatures of twisted bilayer by electron energy-loss spectroscopy**
Steffi Y. Woo, Alberto Zobelli, Robert Schneider, Ashish Arora, Johann A. Preuß, Benjamin J. Carey, Steffen Michaelis de Vasconcellos, **Maurizia Palummo**, Rudolf Bratschitsch, and Luiz H. G. Tizei **Physical Review B** **107** (15), 155429 (2023) (IF=3.9)
- 149) Band Structure and Exciton Dynamics in Quasi-2D Dodecylammonium Halide Perovskites**
G Ammirati, F Martelli, P O'Keeffe, S Turchini, A Paladini, **M Palummo**, et al
Advanced Optical Materials, 2201874 (2023) (IF=10.05)
- 148) Two-dimensional single crystal monoclinic gallium telluride on silicon substrate via transformation of epitaxial hexagonal phase**
E Zallo, A Pianetti, AS Prikhodko, S Cecchi, YS Zaytseva, A Giuliani, M. Kremser, N. I. Borgardt, Jonathan J. Finley, F. Arciprete, **M. Palummo**, O. Pulci, R. Calarco npj 2D Materials and Applications 7 (1), 19 (2023) (IF=11.44)
- 147) Study of Optoelectronic Features in Polar and Nonpolar Polymorphs of the Oxynitride Tin-Based Semiconductor InSnO₂N**
M Palummo, M Re Fiorentin, K Yamashita, IE Castelli, G Giorgi
The Journal of Physical Chemistry Letters 14 (6), 1548-1555 (2023) (IF=6.88)
- 146) Plurality of excitons in Ruddlesden–Popper metal halides and the role of the B-site metal cation**
G Folpini, **M Palummo** et al Materials Advances 4 (7), 1720-1730 (2023) (IF=5.36)
- 145) Two-dimensional borocarbonitrides for photocatalysis and photovoltaics**
W Zhang, C Chai, Q Fan, Y Yang, M Sun, **M Palummo** et al Journal of Materials Chemistry C 11 (11), 3875-3884 (2022) (IF=6.4)
- 144) Interlayer and Intralayer Excitons in AlN/WS₂ Heterostructure**
C Attaccalite, MS Prete, **M Palummo**, O Pulci Materials 15 (23), 8318 (2022) (IF=8.06)
- 143) Excitons and light-emission in semiconducting MoSi₂X₄ two-dimensional materials**
M Sun, M Re Fiorentin, U Schwingenschlögl, **M Palummo** npj 2D Materials and Applications 6 (1), 1-7 (2022) (IF = 11.44)
- 142) Ab Initio Study of Graphene/hBN Van der Waals Heterostructures: Effect of Electric Field, Twist Angles and pn Doping on the Electronic Properties** S Brozzesi, C Attaccalite, F Buonocore, G Giorgi, **M Palummo**, O Pulci
Nanomaterials 12 (12), 2118 (2022) (IF=5.44)
- 141) Advances in two-dimensional green materials for organic electronics applications**
M Palummo, K Yamashita, G Giorgi Sustainable Strategies in Organic Electronics, 391-422 (2022)
- 140) Photo-induced lattice distortion in 2H-MoTe₂ probed by time-resolved core level photoemission**
R Costantini, F Cilento, F Salvador, A Morgante, G Giorgi, **M Palummo**, Martina Dell'Angela
Faraday Discuss., 2022,236, 429-441 (IF=4.08)
- 139) Evidence for equilibrium exciton condensation in monolayer WTe₂**
B.Sun et al Nature Physics 18 (1), 94-99 (2022) (IF = 20.034)
- 138) Strong out-of-plane excitons in 2D hybrid halide double perovskites**
M Palummo, S Postorino, C Borghesi, G Giorgi
Applied Physics Letters 119 (5), 051103 (2021) (IF=4)
- 137) Boosted Solar Light Absorbance in PdS₂/PtS₂ Vertical Heterostructures for Ultrathin Photovoltaic Devices** L Bastonero, G Cicero, **M Palummo**, M Re Fiorentin
ACS applied materials & interfaces 13 (36), 43615-43621 (2021) (IF=10.38)
- 136) Spinorial formulation of the GW-BSE equations and spin properties of excitons in 2D Transition Metal Dichalcogenides** Margherita Marsili, Alejandro Molinas Sanchez, **Maurizia Palummo**, Davide Sangalli, Andrea Marini,
Phys. Rev. B 103, 155152 (2021) (IF=3.78)

- 135) First-principles exciton radiative lifetimes in monolayer graphitic carbon nitride**
Michele Re Fiorentin, Francesca Risplendi, **Maurizia Palummo**, Giancarlo Cicero
ACS Appl. Nano Mater. 2021, 4, 2, 1985–1993 (**IF=5.097**)
- 134) On the Nature of Optical Excitations in Porphyrin Crystals: a Joint Experimental and Theoretical Study**
Maurizia Palummo, Luisa Raimondo, Conor Hogan, Silvia Trabattoni, Claudio Goletti, Adele Sassella, *J. Phys. Chem. Lett.* 2021, 12, 2, 869–875 (**IF=6.38**)
- 133) Ab Initio Theory of Interband Transitions**
Conor Hogan, **Maurizia Palummo**, Olivia Pulci, Carlo Maria Bertoni (2020) in Springer Handbook of Surface Science, 2020
- 132) Theoretical Aspects of Point Defects in Semiconductor Nanowires**
R Rurali, **M Palummo**, X Cartoixa Fundamental Properties of Semiconductor Nanowires, 349-367 (2020) Springer
- 131) Close-Packed Arrangements of Flat-On Free-Base Porphyrins Driven by van der Waals Epitaxy**
M Campione, C Hogan, **M Palummo**, A Bossi, R Yivlialin, G Bussetti *Crystal Growth & Design* 20 (11), 7450-7459 2020 (**IF=3.69**)
- 130) Spatially indirect excitons in black and blue phosphorene double layers**
MR Fiorentin, G Cicero, **M Palummo** *Physical Review Materials* 4 (7), 074009 2020 (**IF=4.86**)
- 129) Ab initio studies of the optoelectronic structure of undoped and doped silicon nanocrystals and nanowires: the role of size, passivation, symmetry and phase** S Ossicini, I Marri, M Amato, **M Palummo**, E Canadell, R Rurali
Faraday discussions 222, 217-239 2020 (**IF=4.008**)
- 128) A monolayer transition-metal dichalcogenide as a topological excitonic insulator**
D Varsano, **M Palummo**, E Molinari, M Rontani *Nature Nanotechnology* 15 (5), 367-372 10 2020 (**IF=39.21**)
- 127) Impact of Impurities on the Electrical Conduction of Anisotropic Two-Dimensional Materials**
J Sun, M Passacantando, **M Palummo**, M Nardone, K Kaasbjerg, A Grillo, ..L.Camilli *Physical Review Applied* 13 (4), 044063 5 2020 (**IF=4.53**)
- 126) A Scalable Method for Thickness and Lateral Engineering of 2D Materials**
J Sun, G Giorgi, **M Palummo**, P Sutter, M Passacantando, L Camilli *Acs Nano* 14 (4), 4861-48704 2020 (**IF=14.58**)
- 125) Strain-induced effects on the electronic properties of 2D materials**
S Postorino, D Grassano, M D'Alessandro, A Pianetti, O Pulci, **M.Palummo**
Nanomaterials and Nanotechnology 10, 1847980420902569 5 2020 (**IF=5.3**)
- 124) Optical Properties of Lead-Free Double Perovskites by Ab Initio Excited-State Methods**
Maurizia Palummo, Eduardo Berrios, Daniele Varsano, Giacomo Giorgi *ACS Energy Letters* 5 (5), 457 7 2020 (**IF=23.21**)
- 123) Interlayer bound wannier excitons in germanium sulfide**
S Postorino, J Sun, S Fiedler, LO Lee Cheong Lem, **M Palummo**, L Camilli *Materials* 13 (16), 3568 2020 (**IF=3.62**)
- 122) Halide Pb-Free Double-Perovskites: Ternary vs. Quaternary Stoichiometry**
M Palummo, D Varsano, E Berrios, K Yamashita, G Giorgi *Energies* 13 (14), 3516 2020 (**IF=3.04**)
- 121) Precise radiative lifetimes in bulk crystals from first principles: the case of wurtzite gallium nitride**
VA Jhalani, HY Chen, **M Palummo**, M Bernardi *Journal of Physics: Condensed Matter* 32 (8), 084001 5 2019 (**IF=3.51**)
- 120) First-Principles Nonequilibrium Green's Function Approach to Ultrafast Charge Migration in Glycine**
E Peretto, D Sangalli, **M Palummo**, A Marini, G Stefanucci *Journal of chemical theory and computation* 15 (8), 4526-45345 (2019) (**IF=6.006**)
- 119) Second-harmonic generation in single-layer monochalcogenides: A response from first-principles real-time**

simulations

C Attaccalite, **M Palummo**, E Cannuccia, M Grüning Physical Review Materials 3 (7), 074003 6 2019 (IF=4.37)

118) Out-of-plane excitons in two-dimensional crystals

I Guillhon, M Marques, LK Teles, **M Palummo**, O Pulci, S Botti, F Bechstedt Physical Review B 99 (16), 161201 112019 (IF=3.78)

117) Ab initio calculations of exciton radiative lifetimes in bulk crystals, nanostructures, and molecules

Hsiao-Yi Chen, Vatsal A. Jhalani, **Maurizia Palummo**, Marco Bernardi Phys. Rev. B 100, 075135 7 2019 (IF=3.78)

116) Tailoring the optical properties of MoS₂ and WS₂ single layers via organic functionalization

M Palummo, N A D'Auria, J C Grossman, Giancarlo Cicero J. Phys.: Condens. Matter 31, 235701 5 (2019) (IF=2.74)

115) Many-body perturbation theory calculations using the yambo code

D Sangalli, A Ferretti, H Miranda, C Attaccalite, I Marri, E Cannuccia, P Melo, M Marsili, F Paleari, A Marrazzo, G Prandini, P Bonfà, M O Atambo, F Affinito, **M Palummo**, A Molina-Sánchez, C Hogan, M Grüning, D Varsano and A Marini Journal of Physics: Condensed Matter 76 2019 (IF=2.74)

114) Ice-Assisted Synthesis of Black Phosphorus Nanosheets as a Metal-Free Photocatalyst: 2D/2D Heterostructure for Broadband H₂ Evolution

Qingzhe Zhang Shengyun Huang Jiuju Deng Deepak Thrithamarassery Gangadharan Fan Yang Zhenhe Xu Giacomo Giorgi **Maurizia Palummo** Mohamed Chaker Dongling Ma Advanced Functional Material 36 2019 (IF=16.83)

113) A route for minimizing emissions: sun-mediated processes and clean batteries

G Giorgi, K Yamashita, **M Palummo**, S Fabris Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry Elsevier (2019)

112) On the Nature of the electronic and optical excitations of Ruddlesden–Popper hybrid organic–inorganic perovskites: The role of the many-body interactions G Giorgi, K Yamashita, **M Palummo** The journal of physical chemistry letters 9 (19), 5891-5896 24 2018 (IF=7.32)

111) Theory and ab initio computation of the anisotropic light emission in monolayer transition metal dichalcogenides HY Chen, **M Palummo**, D Sangalli, M Bernardi Nano Letters 18 (6), 3839-3843 18 2018 (IF= 12.279)

110) Two-dimensional optical excitations in the mixed-valence Cs₂Au₂I₆ fully inorganic double perovskite

G Giorgi, K Yamashita, **M Palummo** Journal of Materials Chemistry C 6 (38), 10197-10201 14 2018 (IF=10.81)

109) Optical and Electronic Properties of Two-Dimensional Layered Materials

Marco Bernardi, Can Ataca, **Maurizia Palummo** and Jeffrey C. Grossman Nanophotonics vol.6, 2 (2017) (IF=2.91)

108) Role of Quantum-confinement in Anatase nanosheets

D Varsano, G Giorgi, K Yamashita, **M Palummo** The journal of physical chemistry letters 8 (16), 3867-3873 13 2017 (IF=8.07)

107) Optical emission in hexagonal SiGe nanowires

X Cartoixa, **M Palummo**, HIT Hauge, EPAM Bakkers, R Rurali Nano letters 17 (8), 4753-4758 36 2017. (IF=12.08)

106) Le matrici tridiagonali in matematica e la loro applicazione in fisica

M Fanfoni, S Trapani, A Sgarlata, **M Palummo**, M Tomellini IT 58 (4), 309-322 (2017)

105) Strongly bound excitons in anatase TiO₂ single crystals and nanoparticles

E. Baldini, L. Chiodo, A. Dominguez, **M. Palummo**, S. Moser, M. Yazdi-Rizi, G. Auböck, B.P.P. Mallett, H. Berger, A. Magrez, C. Bernhard, M. Grioni, A. Rubio & M. Chergui Nature Communications volume 8, Article number: 13 (2017) (IF=12.35)

104) Crystal phase effects in Si nanowire polytypes and their homojunctions

M Amato, T Kaewmaraya, A Zobelli, **M Palummo**, R Rurali Nano letters 16 (9), 5694-5700 32 2016 (IF=12.08)

- 103) Temperature-dependent excitonic effects in the optical properties of single-layer MoS₂**
A Molina-Sánchez, **M Palummo**, A Marini, L Wirtz *Physical Review B* 93 (15), 155435 76 2016 (**IF=3.89**)
- 102) Exciton Radiative Lifetimes in Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides**
Maurizia Palummo, Marco Bernardi *JC Grossman Nano Letters* 15 (5), 2794 403 2015 (**IF=13.75**)
- 101) Ab initio energy loss spectra of Si and Ge nanowires**
M Palummo, C Hogan, S Ossicini *Physical Chemistry Chemical Physics* 17 (43), 29085-29089 3 2015 **IF=3.945**
- 100) Early oxidation stages of the strained Ge/Si (105) surface: A reflectance anisotropy spectroscopy study**
C Goletti, L Fazi, C Hogan, L Persichetti, A Sgarlata, **M Palummo**, et al *Physica status solidi (b)* 252 (1), 87-94 2015 (**IF=1.76**)
- 99) Understanding doping at the nanoscale: the case of codoped Si and Ge nanowires**
M Amato, R Rurali, **M Palummo**, S Ossicini *Journal of Physics D: Applied Physics* 47 (39), 394013 7 2014 (**IF=3.2**)
- 98) Electronic and optical properties of pure and modified diamondoids studied by many-body perturbation theory and time-dependent density functional theory**
T Demján, M Vörös, **M Palummo**, A Gali *The Journal of chemical physics* 141 (6), 064308 23 2014 (**IF=4.3**)
- 97) Probing two-dimensional vs three-dimensional molecular aggregation in metal-free tetraphenylporphyrin thin films by optical anisotropy**
G. Bussetti, M. Campione, L. Ferraro, L. Raimondo, B. Bonanni, C. Goletti, **M. Palummo**, C. Hogan, L. Duò, M. Finazzi, and A. Sassella *The Journal of Physical Chemistry C* 118 (29), 15649-15655 17 2014 (**IF=4.12**)
- 96) Stable alignment of tautomers at room temperature in porphyrin 2D layers**
Gianlorenzo Bussetti Marcello Campione Michele Riva Andrea Picone Luisa Raimondo Lorenzo Ferraro Conor Hogan **Maurizia Palummo** Alberto Brambilla Marco Finazzi Lamberto Duò Adele Sassella Franco Ciccacci *Advanced Functional Materials* 24 (7), 958-963 45 2014 (**IF=11.77**)
- 95) Silicon-germanium nanowires: chemistry and physics in play, from basic principles to advanced applications** M Amato, **M Palummo**, R Rurali, S Ossicini *Chemical reviews* 114 (2), 1371-1412 16 2014 (**IF=60.622**)
- 94) SiGe nanowires for thermoelectrics applications** M Amato, **M Palummo**, S Ossicini, R Rurali *Nanoscale Thermoelectrics*, 497-515 2 2014
- 93) Intermixing and buried interfacial structure in strained Ge/Si (105) facets**
L Fazi, C Hogan, L Persichetti, C Goletti, **M Palummo**, A Sgarlata, A. Balzarotti *Physical Review B* 88 (19), 195312 16 2013 (**IF=3.66**)
- 92) Extraordinary sunlight absorption and one nanometer thick photovoltaics using two-dimensional monolayer materials**
M Bernardi, **M Palummo**, JC Grossman *Nano letters* 13 (8), 3664-3670 1388 2013 (**IF=12.94**)
- 91) Minority surfaces of anatase and their derived nanosheets: a combined DFT and MBPT analysis**
G Giorgi, **M Palummo**, L Chiodo, A Rubio, J Fujisawa, H Segawa, *NANOENERGY Letters* 2013
- 90) Ab Initio Electronic Gaps of Ge Nanodots: The Role of Self-Energy Effects**
M Marsili, S Botti, **M Palummo**, E Degoli, O Pulci, HC Weissker, Miguel A. L. Marques, Stefano Ossicini and Rodolfo Del Sole *The Journal of Physical Chemistry C* 117 (27), 14229-14234 11 2013 (**IF=4.83**)
- 89) Correlation effects in the optical spectra of porphyrin oligomer chains: Exciton confinement and length dependence** C Hogan, **M Palummo**, J Gierschner, A Rubio *The Journal of chemical physics* 138 (2), 01B607 30 2013 (**IF=4.3**)
- 88) Optical absorption modulation by selective codoping of SiGe core-shell nanowires**
M Amato, **M Palummo**, R Rurali, S Ossicini *Journal of Applied Physics* 112 (11), 114323 9 2012 (**IF=2.44**)

- 87) Semiconducting monolayer materials as a tunable platform for excitonic solar cells**
M Bernardi, **M Palummo**, JC Grossman ACS nano 6 (11), 10082-10089 89 2012 (**IF=12.03**)
- 86) The Nature of Radiative Transitions in TiO₂-Based Nanosheets**
M Palummo, G Giorgi, L Chiodo, A Rubio, K Yamashita
The Journal of Physical Chemistry C 116 (34), 18495-18503 22 2012 (**IF=4.12**)
- 85) Band structure analysis in SiGe nanowires**
M Amato, **M Palummo**, S Ossicini Materials Science and Engineering: B 177 (10), 705-711 17 2012 **IF=4.05**)
- 84) Optoelectronic properties in monolayers of hybridized graphene and hexagonal boron nitride**
M Bernardi, **M Palummo**, JC Grossman Physical review letters 108 (22), 226805 104 2012 **IF=7.93**)
- 83) Optical properties of the long-range Si (110)-(16× 2) reconstruction from first principles**
E Ferraro, C Hogan, **M Palummo**, R Del Sole
Physica status solidi (b) 249 (6), 1148-1154 8 2012 (**IF=2.17**)
- 82) Excitons at the (001) surface of anatase: Spatial behavior and optical signatures**
G Giorgi, **M Palummo**, L Chiodo, K Yamashita Physical Review B 84 (7), 073404 25 2011 (**IF=3.89**)
- 81) Coexistence of Negatively and Positively Buckled Isomers on n+-Doped Si (111)– 2× 1**
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
Physical review letters 106 (6), 067601 32 2011 (**IF=9.161**)
- 80) Test of long-range exchange-correlation kernels of time-dependent density functional theory at surfaces: Application to Si (111) 2× 1** O Pulci, A Marini, **M Palummo**, R Del Sole
Physical Review B 82 (20), 205319 13 2010 (**IF=3.95**)
- 79) Silicon and germanium nanostructures for photovoltaic applications: ab-initio results**
S Ossicini, M Amato, R Guerra, **M Palummo**, O Pulci
Nanoscale research letters 5 (10), 1637 43 (2010) (**IF=5.4**)
- 78) Ab initio optoelectronic properties of SiGe nanowires: Role of many-body effects**
M Palummo, M Amato, S Ossicini Physical Review B 82 (7), 073305 22 (2010) (**IF=3.95**)
- 77) Many-body effects on the electronic and optical properties of Si nanowires from ab initio approaches**
M Palummo, S Ossicini, R Del Sole
physica status solidi (b) 247 (8), 2089-2095 7 (2010) (**IF=1.61**)
- 76) Segregation, quantum confinement effect and band offset for [110] SiGe NWs**
M Amato, **M Palummo**, S Ossicini
physica status solidi (b) 247 (8), 2096-2101 16 (2010) (**IF=1.61**)
- 75) Convergence study of neutral and charged defect formation energies in Si nanowires**
R Rurali, **M Palummo**, X Cartoixa
Physical Review B 81 (23), 235304 36 2010 (**IF=3.95**)
- 74) Giant excitonic exchange splitting in Si nanowires: first-principles calculations**
M Palummo, F Iori, R Del Sole, S Ossicini
Physical Review B 81 (12), 121303 20 2010 (**IF=3.95**)
- 73) Electronic and optical properties of Si and Ge nanocrystals: An ab initio study**
O Pulci, E Degoli, F Iori, M Marsili, **M Palummo**, R Del Sole, S Ossicini
Superlattices and Microstructures 47 (1), 178-181 3 2010 (**IF=2.65**)
- 72) Experimental and theoretical investigation of the pyrrole/Al (100) interface**
A Ruocco, L Chiodo, M Sforzini, **M Palummo**, P Monachesi, G Stefani

The Journal of Physical Chemistry A 113 (52), 15193-15197 8 2009 (IF=2.78)

71) SiGe nanowires: Structural stability, quantum confinement, and electronic properties

M Amato, **M Palummo**, S Ossicini

Physical Review B 80 (23), 235333 47 2009 (IF=3.55)

70) Ab initio electronic and optical spectra of free-base porphyrins: The role of electronic correlation

M Palummo, C Hogan, F Sottile, P Bagalá, A Rubio

The Journal of chemical physics 131 (8), 08B607 144 2009 (IF=3.03)

69) Electronic and optical properties of acetylene and ethylene on Si (001)

M Marsili, O Pulci, **M Palummo**, PL Silvestrelli, R Del Sole

Superlattices and Microstructures 46 (1-2), 240-245 2 2009 (IF=2.65)

68) Electronic properties and dielectric response of surfaces and nanowires of silicon from ab-initio approaches

M Palummo, F Iori, R Del Sole, S Ossicini

Superlattices and Microstructures 46 (1-2), 234-239 5 2009 (IF=2.65)

67) Theory of dielectric screening and electron energy loss spectroscopy at surfaces

C Hogan, **M Palummo**, R Del Sole

Comptes Rendus Physique 10 (6), 560-574 7 2009 (IF=1.5)

66) Reduced quantum confinement effect and electron-hole separation in SiGe nanowires

M Amato, **M Palummo**, S Ossicini

Physical Review B 79 (20), 201302 48 2009 2010 (IF=3.95)

65) Reflectance-anisotropy spectroscopy and surface differential reflectance spectra at the Si (100) surface: Combined experimental and theoretical study

M Palummo, N Witkowski, O Pluchery, R Del Sole, Y Borensztein

Physical Review B 79 (3), 035327 56 2009 (IF=3.55)

64) Novel optoelectronic properties of simultaneously n-and p-doped silicon nanostructures

F. Iori, E Degoli, **M Palummo**, S Ossicini

Superlattices and Microstructures 44 (4-5), 337-347 25 2008 (IF=2.65)

63) Ab-initio optical spectra of complex systems

E Cannuccia, O Pulci, **M Palummo**, V Garbuio, RD Sole

Physica status solidi c 5 (8), 2543-2550 2 2008 (IF=3.27)

62) EXCITED STATE PROPERTIES CALCULATIONS: FROM 0 TO 3 DIMENSIONAL SYSTEMS

M Marsili, V Garbuio, M Bruno, O Pulci, **M Palummo**, E Degoli, E Luppi

EPIOPTICS-9, 41-61 2008

61) Ab-initio electronic and optical properties of low dimensional systems: From single particle to many-body approaches

M Palummo, M Bruno, O Pulci, E Luppi, E Degoli, S Ossicini, R Del Sole

Surface science 601 (13), 2696-2701 7 2007 (IF=1.94)

60) First-principles optical properties of silicon and germanium nanowires

M Bruno, **M Palummo**, S Ossicini, R Del Sole

Surface science 601 (13), 2707-2711 58 2007 (IF=1.94)

59) From Si nanowires to porous silicon: the role of excitonic effects

M Bruno, **M Palummo**, A Marini, R Del Sole, S Ossicini

Physical review letters 98 (3), 036807 163 2007 (IF=7.2)

58) Ab initio calculation of many-body effects on the EEL spectrum of the C (100) surface

M Palummo, O Pulci, A Marini, L Reining, R Del Sole

Physical Review B 74 (23), 235431 14 2006 (IF=3.55)

57) *Geometry and electronic band structure of surfaces: the case of Ge (111): Sn and C (111)*

O Pulci, M Marsili, P Gori, **M Palummo**, A Cricenti, F Bechstedt, R Del Sole
Applied Physics A 85 (4), 361-369 10 2006. (IF=2.11)

56) *First-principles optical spectra of low dimensional systems*

L Chiodo, M Bruno, **M Palummo**, P Monachesi
Physica status solidi (b) 242 (15), 3032-3039 5 2005 (IF=0.9)

55) *Excitons in germanium nanowires: Quantum confinement, orientation, and anisotropy effects within a first-principles approach*

M Bruno, **M Palummo**, A Marini, R Del Sole, V Olevano, AN Kholod
Physical Review B 72 (15), 153310 123 2005 (IF=3.02)

54) *Reflectance Anisotropy Spectra of the Diamond (100)-(2 × 1) Surface: Evidence of Strongly Bound Surface State Excitons*

M Palummo, et al Physical review letters 94 (8), 087404 40 2005 (IF=5.83)

53) *Ab-initio excited states calculations for semiconductor materials: from bulk to low dimensional systems* **M.Palummo**,

M. Bruno E. Del Sole, S. Ossicini
Physics, Chemistry and Application of Nanostructures, 3-10 2005

52) *Theory of Surface Optical Properties*

O Pulci, **M Palummo**, M Marsili, R Del Sole Advances in Solid State Physics, 161-173 2 2005 (IF=5.37)

51) *The Bethe–Salpeter equation: a first-principles approach for calculating surface optical spectra*

M Palummo, O Pulci, R Del Sole, A Marini, P Hahn, WG Schmidt, ...
Journal of Physics: Condensed Matter 16 (39), S4313 25 2004 (IF=2.74)

50) *Ab-initio optical properties of Bn(110) and GaN(110) surfaces*

G Cappellini G Satta, **M Palummo**, G Onida EPIOPTICS-7, 44-51 2004

49) *Electronic and Optical Properties of SiGe alloys within first-principles schemes*

G Cappellini, G Satta, **M Palummo**, G Onida MRS Online Proceedings Library Archive 829 2004

48) *Theory of Surface Optical Properties* R Del Sole, **M Palummo**, O Pulci EPIOPTICS-7, 1-20 2004

47) *First-principles optical spectra of semiconductor surfaces: from one particle to many-body approach*

M Palummo, O Pulci, R Del Sole EPIOPTICS-7, 29-432004

46) *First-principles study of acetylene adsorption on Si (100): The end-bridge structure*

PL Silvestrelli, O Pulci, **M Palummo**, R Del Sole, F Ancilotto
Physical Review B 68 (23), 235306 57 2003 (IF=2.19)

45) *Ab-initio study of the adsorption of acetylene on Si (001) surface*

O Pulci, PL Silvestrelli, **M Palummo**, F Ancilotto, R Del Sole
physica status solidi (c), 2997-3001 1 2003 (IF=3.27)

44) *Ab initio calculation of depth-resolved optical anisotropy of the Cu(110) surface*

P Monachesi, **M Palummo**, R Del Sole, A Grechnev, O Eriksson
Physical Review B 68 (3), 035426 20 2003 (IF=2.19)

43) *Ab initio investigation of the adsorption of organic molecules at Si (1 1 1) and Si (1 0 0) surfaces*

R Di Felice, CA Pignedoli, CM Bertoni, A Catellani, PL Silvestrelli, C. Sbraccia, F. Ancilotto, **M. Palummo**, O. Pulci
Surface science 532, 982-987 12 2003 (IF=2.04)

42) *Surfaces, interfaces, microstructures, and related topics-First-principles study of acetylene adsorption on Si (100): The end-bridge structure*

PL Silvestrelli, O Pulci, **M Palummo**, RD Sole, F Ancilotto

Physical Review-Section B-Condensed Matter 68 (23), 235306-235306 2003 (IF=2.19)

41) Surface second-harmonic generation from Si (111)(1×1) H: Theory versus experiment

JE Mejia, BS Mendoza, **M Palummo**, G Onida, R Del Sole, S Bergfeld, ...

Physical Review B 66 (19), 195329 34 2002 (IF=3.66)

40) Anisotropy of surface optical properties at BN (110): An ab initio study

G Cappellini, G Satta, **M Palummo**, G Onida Physical Review B 66 (11), 115412 7 2002 (IF=3.66)

39) Surfaces, interfaces, microstructures, and related topics-Surface second-harmonic generation from Si (111)(1×1) H: Theory versus experiment JE Mejia, BS Mendoza, **M Palummo**, G Onida, RD Sole, S Bergfeld, et al. Physical Review-Section B-Condensed Matter 66 (19), 195329-195329 2002 (IF=3.66)

38) Many-Body Effects on the Electronic and Optical Properties of Bulk GaP

O Pulci, **M Palummo**, V Olevano, G Onida, L Reining, R Del Sole

Physica status solidi (a) 188 (4), 1261-1266 12 2001 (IF=1.98)

37) Theory for modeling the optical properties of surfaces

G Onida, WG Schmidt, O Pulci, **M Palummo**, A Marini, C Hogan, et al. Physica status solidi (a) 188 (4), 1233-1242 9 (2001) (IF=1.98)

36) Ab initio optical properties of BN in the cubic and in the layered hexagonal phase

G Satta, G Cappellini, **M Palummo**, G Onida Computational materials science 22 (1-2), 78-80 10 2001 (IF=3.3)

35) Reflectance anisotropy spectra of Cu and Ag (110) surfaces from ab initio theory

P Monachesi, **M Palummo**, R Del Sole, R Ahuja, O Eriksson Physical Review B 64 (11), 115421 31 2001 (IF=3.39)

34) Ab initio pseudopotential calculation of the equilibrium structure of tin monoxide

M Meyer, G Onida, **M Palummo**, L Reining Physical Review B 64 (4), 045119 44 2001 (IF=3.39)

33) Optical properties of BN in cubic and layered hexagonal phases

G Cappellini, G Satta, **M Palummo**, G Onida Physical Review B 64 (3), 035104 80 2001 (IF=3.39)

32) Ab initio calculation of second-harmonic-generation at the Si (100) surface

BS Mendoza, **M Palummo**, G Onida, R Del Sole Physical Review B 63 (20), 205406 43 2001 (IF=3.39)

31) All-Electron versus Pseudopotential Calculation of Optical Properties: The Case of GaAs

P Monachesi, A Marini, G Onida, **M Palummo**, R Del Sole Physica status solidi (a) 184 (1), 101-104 9 2001 (IF=1.98)

30) Optical properties of germanium quantum dots

M Palummo, G Onida, R Del Sole, A Stella, P Tognini, P Cheyssac, ...

Physica status solidi (b) 224 (1), 247-251 14 2001 (IF=1.71)

29) Electronic structure: Wide-band, narrow-band, and strongly correlated systems-Ab initio pseudopotential calculation of the equilibrium structure of tin monoxide

M Meyer, G Onida, **M Palummo**, L Reining

Physical Review-Section B-Condensed Matter 64 (4), 45119-45119 2001 (IF=3.39)

28) Optical spectra of germanium nanocrystals: experiments and theory

A Stella, P Tognini, P Cheyssac, R Kofman, **M Palummo**, G Onida, ...

International conference on the physics of semiconductors: ICPS 87, 1283-1284 2001

27) All-electron versus Pseudopotential Calculation of Optical Properties ...

P Monachesi, A Marini, G Onida, **M Palummo**, RD Sole

Physica Status Solidi-A-Applied Research 184 (1), 101-104 2001 (IF=1.98)

26) Reflectance anisotropy spectra of Cu and Ag (110) surfaces from ab initio theory

- P Monachesi, **M Palummo**, SR Del, R Ahuja, O Eriksson
PHYSICAL REVIEW B 6411 (11), 5421-+ Language: English 2001 (IF=3.39)
- 25) *Reflectivity Anisotropy Spectra of Cu-and Ag-(110) surfaces from theory*
P Monachesi, **M Palummo**, R Del Sole, O Eriksson, R Ahuja Phys. Rev. B, 64, 115421 (2001) (IF=3.39)
- 24) *Structural and optical properties of the Ge (111)-(2× 1) surface*
M Rohlfing, **M Palummo**, G Onida, R Del Sole
Physical review letters 85 (25), 5440 87 2000 2001 (IF=2.97)
- 23) *First-principles calculations of electronic excitations in clusters*
L Reining, O Pulci, **M Palummo**, G Onida
International Journal of Quantum Chemistry 77 (6), 951-960 13 (2000) (IF=1.37)
- 22) *Exchange and correlation effects beyond the LDA on the dielectric function of silicon*
V Olevano, **M Palummo**, G Onida, R Del Sole
Physical Review B 60 (20), 14224 52 1999 (IF=3.55)
- 21) *Nonlocal density scheme for electronic-structure calculations*
M Palummo, G Onida, R Del Sole, M Corradini, L Reining
Physical Review B 60 (16), 11329 22 1999 (IF=3.55)
- 20) *Monohydride formation on vicinal Si (001) investigated by reflectance anisotropy spectroscopy*
JR Power, W Richter, **M Palummo**, G Onida, R Del Sole
physica status solidi (a) 175 (1), 63-69 1 1999 (IF=1.98)
- 19) *Theoretical study of the surface optical properties of clean and hydrogenated GaAs (110)*
O Pulci, **M Palummo**, AJ Shkrebtii, G Onida, R Sel Sole
physica status solidi (a) 175 (1), 71-76 2 1999 (IF=1.98)
- 18) *Optical properties of germanium nanocrystals*
M Palummo, G Onida, R Del Sole
physica status solidi (a) 175 (1), 23-31 35 1999 (IF=1.98)
- 17) *Ab initio optical properties of Si (100)*
M Palummo, G Onida, R Del Sole, BS Mendoza
Physical Review B 60 (4), 2522 83 1999 (IF=3.55)
- 16) *Monohydride Formation on Vicinal Si (001) Investigated by ...*
JR Power, W Richter, **M Palummo**, G Onida, RD Sole
Physica Status Solidi-A-Applied Research 175 (1), 63-70 1999 (IF=1.98)
- 15) *Theoretical Study of the Surface Optical Properties of ...*
O Pulci, **M Palummo**, AJ Shkrebtii, G Onida, RD Sole
Physica Status Solidi-A-Applied Research 175 (1), 71-76 1999 (IF=1.98)
- 14) *Ab-Initio Calculation of the Optical Properties of Surfaces*
G Onida, R Del Sole, **M Palummo**, O Pulci, L Reining
Physica status solidi (a) 170 (2), 365-375 7 1998 (IF=1.98)
- 13) *Analytical expressions for the local-field factor $G(q)$ and the exchange-correlation kernel $K_{xc}(r)$ of the homogeneous electron gas* M Corradini, R Del Sole, G Onida, **M Palummo**
Physical Review B 57 (23), 14569 111 1998 (IF=3.55)
- 12) *Screening models and simplified GW approaches: Si & GaN as test cases*
M Palummo, R Del Sole, L Reining, F Bechstedt, G Cappellini
Solid state communications 95 (6), 393-398 22 1995 (IF=1.8)
- 11) *Electronic structure of cubic GaN with self-energy corrections*

M Palummo, L Reining, RW Godby, CM Bertoni, N Börnsen
EPL (Europhysics Letters) 26 (8), 607-61 1994. **(IF=2.75)**

10) First principles simulations

M Palummo, L Reining, P Ballone

Le Journal de Physique IV 3 (C7), C7-1955-C7-1964 1993

9) Optical absorption of Tl^+ ions in $KMgF_3$ crystals

A Scacco, S Fioravanti, M Missori, UM Grassano, A Luci, **M Palummo**, et al.

Journal of Physics and Chemistry of Solids 54 (9), 1035-1041 1993 **(IF=3.99)**

8) Electronic structure with self-energy corrections for gallium nitride

M Palummo, L Reining, RW Godby, CM Bertoni

Proceedings of the 21st International Conference on the Physics 1993

7) The electronic structure of gallium nitride **M Palummo**, CM Bertoni, L Reining, F Finocchi

Wide-Band-Gap Semiconductors, 404-409 1993

6) Hydrogen covered Si (111) surfaces

MB Nardelli, F Finocchi, **M Palummo**, R Di Felice, CM Bertoni, ...

Surface science 269, 879-885 1992 **(IF=1.94)**

5) Optical Properties of $(F)H$ Centers in $NaCl:SH^-$ Crystals

M Casalbani, D De Viry, UM Grassano, A Luci, **M Palummo**, A Scacco

physica status solidi (b) 170 (2), 675-680 1992 **(IF=1.71)**

4) Gallium nitride: ground state properties and excited states

M Palummo, L Reining, RW Godby, CM Bertoni Vuoto Scienza e Tecnologia 22, 63-63 1992

3) Optical properties of (F) and F -aggregate centers in $NaCl$: crystals

G Baldacchini, M Cremona, M Casalbani, D De Viry, UM Grassano, A Luci, **M. Palummo**, L. Casalis, P. Minguzzi, F.

Pozzi, M. Tonelli, and A. Scacco Physical Review B 44 (22), 12189 1991 **(IF=3.55)**

2) Optical properties of (F_2^+) H centers in $NaCl:OH^-$ crystals

L Casalis, P Minguzzi, F Pozzi, M Tonelli, A Scacco, M Casalbani, D Viry, U. M. Grassano, A. Luci, **M. Palummo**, G.

Baldacchini and M. Cremona Radiation Effects and Defects in Solids 119 (2), 547-552 1991

1) VUV excitation levels of Cr^{3+} luminescence in indium fluoride garnet

D De Viry, M Casalbani, **M Palummo**, N Zema

Solid state communications 76 (8), 1051-1054 1990 **(IF=1.8)**

Dichiaro esplicitamente che tutto quanto dichiarato in tale CV corrisponde a verità, ai sensi degli articoli 46 e 47 del D.P.R. 445 del 2000.

Roma 10/12/2024

Firma

Maurizia Palummo

