

LINEE DI RICERCA DI ATENEO 2011-2013

TITOLO:

Italiano: **Nanosistemi, materiali e sistemi emergenti per tecnologie sostenibili**

Inglese: ***Nano- and emerging materials and systems for sustainable technologies***

RESPONSABILE SCIENTIFICO:

Nome: Elisa

Cognome: Molinari

Titolo: prof. ordinario

CV: allegato 1 / annex 1

ABSTRACT (max 300 parole):

Italiano: Capire i fenomeni e i processi fisici e chimici fondamentali alla nanoscala può avere impatto diretto sul controllo delle funzionalità dei nanosistemi, delle loro interfacce con la scala meso- e micro-scopica e della loro aggregazione in architetture complesse, nonché contribuire allo sviluppo di tecnologie radicalmente innovative. D'altra parte, sono gli sviluppi nei metodi, nella strumentazione e nelle tecnologie ad aprire la strada alla comprensione delle proprietà fondamentali della materia.

In questa linea strategica la **convergenza** degli approcci della fisica, della chimica, delle scienze della vita e dell'ingegneria, sostenuti da una solida matematica, è alla base di uno sforzo coeso verso concetti e sistemi emergenti che facciano avanzare la conoscenza e al tempo stesso migliorino tecnologie e processi in termini della loro sostenibilità.

Modena ha diversi punti di forza in questi campi, che qui vengono combinati per la prima volta in modo coerente. Il gruppo di ricerca comprende oltre 60 ricercatori e docenti di 5 dipartimenti e almeno altrettanti post-doc e studenti di dottorato. Un contributo rilevante viene dall'Istituto Nanoscienze del CNR che ha il suo Centro S3 nel campus e partecipa con 20 ulteriori ricercatori strutturati e 15 post-doc. La strumentazione disponibile comprende laboratori allo stato dell'arte per nanofabbricazione, chimica, microscopie, spettroscopie e calcolo, alcuni sviluppati e gestiti in collaborazione con il CNR. La rete di collaborazioni e progetti coinvolge centri di punta in Italia e nel mondo, ma anche la rete dei laboratori regionali, compresi alcuni importanti partner industriali.

Uno dei nostri punti di forza è l'impegno nell'alta formazione attraverso la ricerca di frontiera: due scuole di dottorato di Modena sono incentrate su questa linea di ricerca e altre vedono una nostra importante partecipazione. In un recente bando competitivo sono stati approvati ben quattro programmi regionali di dottorato che ci coinvolgono, due dei quali da noi coordinati.

Inglese: *Fundamental understanding of physical phenomena and processes can have direct impact on the control of structure and functionalities of nanoscale systems, their interfaces with the meso- and micro-scales, and their assembly into complex architectures, and can foster the development of radically innovative*

technologies. Conversely, key advances in methods, tools and technologies are critical for state-of-the-art investigations of the basic properties of matter.

In the present research line, the **convergence** of the approaches of physics, chemistry, life sciences, mathematics and engineering, is the basis of a joint effort towards emerging concepts and systems which can both advance substantially our knowledge and improve technologies and processes in terms of their sustainability.

Modena has a number of strengths in such fields, that we here combine for the first time in a coherent way. The research team overall exceeds 60 staff members from 5 departments and a comparable number of post-docs and PhD students. In addition, a relevant contribution comes from Nanoscience Institute of CNR, which has its S3 Center on campus and participates with over 20 staff researchers and 15 post-docs. The available facilities include state of the art nanofabrication, chemistry, microscopy, spectroscopy, and computational laboratories, some of which are developed and operated in collaboration with CNR. The network of collaborations and projects comprises leading laboratories in Europe and worldwide, as well as regional laboratories including some important industrial partners.

Education through frontier research is one of the strengths of the team. Two PhD schools are centered on the present research line, and we contribute to two additional schools. Two regional PhD programs coordinated by our teams were recently selected on a competitive basis.

OBIETTIVI (max 150 parole)

Italiano: Attraverso 4 workpackage interconnessi (v. figura) svilupperemo:

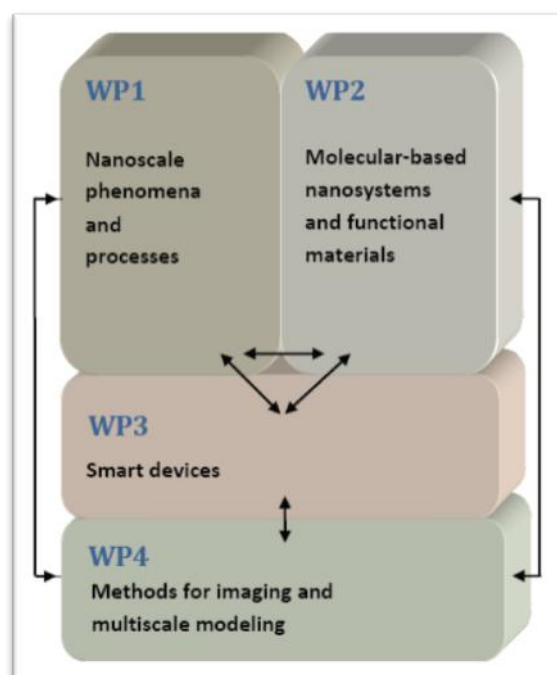
- concetti, architetture, materiali per studi fondamentali e applicazioni di frontiera;
- dispositivi e loro integrazione dalla nano- alla micro- e meso-scala;
- metodi sperimentali, modelli matematici e teorico-computazionali innovativi, *software library* per problemi multiscale su sistemi ibridi, imaging di larga scala e applicazioni alle microscopie.

Intendiamo inoltre:

- avviare a Modena infrastrutture per la microscopia e l'imaging e per il calcolo scientifico ad alte prestazioni, integrate nella rete delle infrastrutture regionali, nazionali ed europee. Rafforzare il coordinamento di reti e progetti di ricerca, in prospettiva nel contesto delle flagship europee in FP7 e Horizon 2020.

Coordinamento:

- strutturare attività comuni attraverso seminari e gruppi coordinati che coinvolgano anche studenti e post-doc;
- organizzare workshop internazionali per meglio consolidare questa linea di ricerca e le sue collaborazioni e visibilità;
- sviluppare il portale web e curare la comunicazione scientifica a tutti i livelli.



Inglese:

Though 4 interconnected work packages (see figure) we will develop:

- concepts, architectures and materials for fundamental studies and frontier applications;*
- devices and their integration from the nano- to the micro- and meso-scale;*
- experimental methods, mathematical models and innovative theoretical/computational approaches, software libraries for multiscale problems on hybrid systems, large scale imaging and applications for microscopies.*

In addition, we aim at setting up in Modena new infrastructures for microscopy, imaging and high-performance-computing software, integrated within the network of regional, national and international infrastructures, and strengthen the coordination in network and projects, especially in the perspective of Fp7 flagships and Horizon 2020.

Concerning coordination, we plan to

- structure joint activities through seminar series and specific thematic thrusts, with strong active role of students and post docs;*
- organize international workshops to help shape its interaction and visibility in Modena and beyond.*
- develop a web portal and invest in science communication at all levels.*

AREA/E CUN DI RIFERIMENTO principali:

02 Scienze Fisiche, 03 Scienze Chimiche, 01 Scienze matematiche e informatiche

DIPARTIMENTI COINVOLTI: 5

Fisica, Chimica, Matematica Pura e Applicata, Ingegneria dei Materiali e dell'Ambiente, Ingegneria dell'Informazione

RICERCATORI A TEMPO PIENO: 63

PO: 21

PA: 19

RU: 23

(elenchi nominali per fascia in allegato 2)

63 staff researchers in total. WP distribution:

WP1 Nanoscale phenomena and processes 15 staff researchers

WP2 Molecular-based nanosystems and functional materials 15 staff researchers

WP3 Smart devices 15 staff researchers

WP4 Methods for imaging and multiscale modeling 18 staff researchers

(see Annex 2)

PERSONALE TECNICO STRUTTURATO:

WP1 Nanoscale phenomena and processes - 3 technologists (tecnici laureati), 4 technicians (+ 2 CNR technologists)

WP2 Molecular-based nanosystems and functional materials - to be defined (at the Chemistry Dept. most technicians are assigned to the Dept., not to individual research groups)

WP3 Smart devices -2 technicians

WP4 Methods for imaging and multiscale modeling – 1 technologist, 1 technician + 2 technicians from CNR
(elenco nominale in allegato 3) (see Annex 3)

PERSONALE DI RICERCA NON STRUTTURATO:

83 non-staff researchers are present to date (several are shared among different WPs). More specifically:

Fixed term researchers (TD, CoCoCo):	3 + 6 from CNR
Post docs (Assegni di Ricerca):	5 + 10 from CNR
PhD students (dottorandi):	32
Fellows (Borsisti):	11
CNR Staff researchers directly involved in the project: 16	
(full list in Annex 4)	

In tutto 83 persone. Più specificamente:

RTD:	3 + 6 del CNR
Assegnisti di Ricerca:	5 + 10 del CNR
Dottorandi di Ricerca:	32
Borsisti:	11
Contrattisti:	
Specializzandi:	
Altri:	16 (Ricercatori CNR partecipanti al progetto)

(in allegato 4 l'elenco nominale per categoria).

LABORATORI:

(elenco in allegato 5)

PIATTAFORME TECNOLOGICHE E GRANDI STRUMENTAZIONI:

(elenco in allegato 6).

DATABASE DEDICATI:

(elenco in allegato 7)

TIPOLOGIA DI RICERCA (specificare %):

Base: 50%
Applicata: 40%
Industriale: 10%

IMPATTO DELLA RICERCA (specificare %)

Locale/Regionale: 15%
Nazionale: 15%
Internazionale: 70%

RETI COLLABORATIVE NON OCCASIONALI:

Nazionali:
Internazionali:
(elenco in allegato 8)

FINANZIAMENTI 2006-settembre 2011:

Commerciali/non competitivi:	EUR 1.451.000
Regionali competitivi:	EUR 1.130.000
Nazionali competitivi:	EUR 2.783.000
Internazionali competitivi:	EUR 3.518.000
Totali	Eur 8.882.000

FINANZIAMENTI TOT/ANNO: € 1.544.695

Includendo anche il CNR (* vedi sotto):

FINANZIAMENTI TOT/ANNO € 3.109.695 (€ 1.544.695 + € 1.565.000 CNR)

* This proposal includes the contribution of the **Modena S3 Center of CNR Nanoscience Institute, with a budget in excess of 9 million Euro in the period 2006-2011** (staff excluded). Within this budget, approx. 2.300 kEuro are from Commercial, 800 kEuro from Regional, 600 kEuro from National, 3.700 kEuro Internat projects, the rest is from CNR resources. Based on official agreements, the CNR and associated University staff of the present research line have access to CNR labs and resources.

Note also the substantial support obtained from competitive grants at supercomputing facilities, amounting to about 3000 khours/year in the last few years.

(Elenco in allegato 9)

DOTTORATI DI RICERCA:

- Physics and nano sciences
- Multiscale modelling, computational simulations and characterization in material and life sciences
- Information and communication technologies

Further contributions to the PhD schools on

- Science and technologies for health products
- Earth system sciences: environment, resources and cultural heritage

TECNOPOLO/I COINVOLTI:

- Centro Interdipartimentale per la ricerca applicata e i servizi nel settore della meccanica avanzata e della motoristica (Centro Intermech-MO.RE)
- Centro Interdipartimentale per la ricerca industriale e il trasferimento tecnologico nel settore delle tecnologie integrate per la ricerca sostenibile, della conversione efficiente dell'energia, l'efficienza energetica degli edifici, l'illuminazione e la domotica (Centro En&Tech).

CENTRI DIPARTIMENTALI O INTERDIPARTIMENTALI COINVOLTI:

Centro Interdipartimentale per la ricerca applicata e i servizi nel settore della meccanica avanzata e della motoristica (Centro Intermech-MO.RE)

Centro Interdipartimentale Grandi Strumenti (CIGS)

Laboratorio dipartimentale di Analisi Chimica (LADAC)

SPIN-OFF:

WP3 - Embit (2004)

BREVETTI:

- L. Rovati And G. Staurengi "Monitoring Of Retinal Temperature During Laser Therapy" United States Patent N. 7,465,299, 2008
- A. Bandera, M. Donini, Maurizio L. Rovati "Method and Instrument for the Non-Invasive Measurement of the Oxygenation/Saturation of Biological Tissue," PCT/IT2008/000649, 2008. da Patent Scope:
<http://www.wipo.int/patentscope/search/en/detail.jsf?docId=WO2009050757>
- G. Porro, R. Pozzi, A. Torinesi, M. Norgia, L. Rovati, "Method for Measuring a Fluid Velocity and Related Apparatus," PCT/IB2010/051099, 2010
- P. Facci, A. Zuccato, A. Alessandrini, "Rapid monitoring system for blood groups and immunohematological reaction detection" Publ. date: 2004-12-22, Publ. n. ITVR20040149.
- I.L Medintz, L. Berti, H. Matoussi, P. Facci "Modular linkers for conjugation of organic substances to substantially inorganic substances and methods of manufacture and use thereof" Publ. date: 2009-06-25, Publ. n. US2009159842.
- P. Facci, A. Alessandrini, A. Zuccato "A construct comprising a Ni and/or Au substrate" n. PCT/IB2010/051975. Date 2010-05-05.
- F. Ghelfi, L. Cotarca, F. Roncaglia, R. Giovannetti, A. Nicoli "Process for preparing Gabapentin", WO 2008/004115 A1"

50 PUBBLICAZIONI RILEVANTI DELLA LINEA DI RICERCA:

publications are not chosen on the basis of IFs/citations only.

1. Medintz, IL; Berti, L; Pons, T; Grimes, AF; English, DS; Alessandrini, A; Facci, P; Matoussi, H
A reactive peptidic linker for self-assembling hybrid quantum dot-DNA bioconjugates
NANO LETTERS **7**, 1741-1748 (2007) IF 9.991, CIT 61
2. Luches, P; Bellini, V; Colonna, S; Di Giustino, L; Manghi, F; Valeri, S; Boscherini, F
Iron oxidation, interfacial expansion, and buckling at the Fe/NiO(001) interface
PHYSICAL REVIEW LETTERS **96**, 106106 (2006) IF 7.328, CIT 20
3. Sanchez-Barriga, J ; Minar J; Braun, J; Varykhalov, A; Boni, V; Di Marco, I; Rader, O; Bellini, V; Manghi, F; Ebert, H; Katsnelson, MI; Lichtenstein, AI; Eriksson, O; Eberhardt, W; Durr, HA; Fink, J
Strength of Correlation Effects in the Electronic Structure of Iron
PHYSICAL REVIEW LETTERS **103**, 267203 (2009) IF 7.621, CIT 14
4. Righi MC, Ferrario M
Pressure induced friction collapse of rare gas boundary layers sliding over metal surfaces
PHYSICAL REVIEW LETTERS **99**, 176101 (2007) IF 7.328, CIT 4
5. Rosini, M; Magri, R
Surface Effects on the Atomic and Electronic Structure of Unpassivated GaAs

Nanowires

ACS NANO 4, 6021-6031 (2010)

IF=7.493

6. Rousseau R, De Renzi V, Mazzarello R, Marchetto D, Biagi R, Scandolo S, del Pennino U
Interfacial electrostatics of self-assembled monolayers of alkane thiolates on Au(111): Work function modification and molecular level alignments
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110, 10862-10872 (2006)
7. Mannini M, F. Pineider, C. Danieli, F. Totti, L. Sorace, Ph. Saintavit, M.-A. Arrio, E. Otero, L. Joly, J. C. Cesar, A. Cornia, R. Sessoli
Quantum Tunneling of the Magnetization in a Monolayer of Oriented Single Molecule Magnets
Nature 468, 417-421 (2010) IF 34.48, CIT 29
8. Mannini M, F. Pineider, Ph. Saintavit, C. Danieli, E. Otero, C. Sciancalepore, A. M. Talarico, M.-A. Arrio, A. Cornia, D. Gatteschi, R. Sessoli
Magnetic Memory of a Single-molecule Quantum Magnet Wired to a Gold Surface
Nat. Mater. 8, 194-197 (2009) (Highlighted by Nat. Mater. 8 (2009) 165 by H. Wende) IF 29.50, CIT 114
9. Bogani L, C. Danieli, E. Biavardi, N. Bendiab, A.-L. Barra, E. Dalcanale, W. Wernsdorfer, A. Cornia
Single-Molecule-Magnet Carbon-Nanotube Hybrids
Angew. Chem. 121, 760-764 (2009); Angew. Chem. Int. Ed. 48, 746-750 (2009) IF 11.83, CIT 22
10. L. Bogani, L. Cavigli, M. Gurioli, R. L. Novak, M. Mannini, A. Caneschi, F. Pineider, R. Sessoli, M. Clemente-León, E. Coronado, A. Cornia, D. Gatteschi
Magneto-optical Investigations of Nanostructured Materials Based on Single Molecule Magnets Monitor Strong Environmental Effects
Adv. Mater. 19, 3906-3911 (2007) IF 8.38, CIT 38
11. A. Cornia, M. Mannini, Ph. Saintavit, R. Sessoli
Chemical Strategies and Characterization Tools for the Organization of Single Molecule Magnets on Surfaces
Chem. Soc. Rev. 40, 3076-3091(2011) IF 20.09
12. Ferrari E, G. Lusvardi, V. Aina, G. Malavasi, F. Fantini, C. Morterra, F. Pignedoli, M. Saladini, L. Menabue
The Role of Coordination Chemistry in the Development of Innovative Gallium-based Bioceramics: the Case of Curcumin
J. Mater. Chem. 21, 5027-5037 (2011) IF 4.80
13. Roncaglia F, C. V. Stevens, F. Ghelfi, M. Van der Steen, M. Pattarozzi, L. De Buyck
A New Synthetic Route to Tyromycin A and Its Analogue from Renewable Resources
Tetrahedron 65, 1481-1487 (2009) IF 3.22, CIT 6
14. Sgobba V, A. Troeger, R. Cagnoli, A. Mateo-Alonso, M. Prato, F. Parenti, A. Mucci, L. Schenetti, D. M. Guldi

Electrostatic Layer-by-Layer Construction and Characterization of Photo-electrochemical Solar Cells Based on Water Soluble Polythiophenes and Carbon Nanotubes

J. Mater. Chem. 19, 4319–4324 (2009) IF 4.80, CIT 12

15. Parenti F, P. Morvillo, E. Bobeico, R. Diana, M. Lanzi, C. Fontanesi, F. Tassinari, L. Schenetti, A. Mucci
(Alkylsulfanyl)bithiophene-alt-Fluorene: π -Conjugated Polymers for Organic Solar Cells
Eur. J. Org. Chem. 5659-5667 (2011) IF 3.20
16. Timco, GA; Carretta, S; Troiani F; Tuna F; Pritchard, RJ; Muryn, CA; McInnes, EJJ; Ghirri, A; Candini, A; Santini, P; Amoretti, G; Affronte, M; Winpenny, REP
Engineering the coupling between molecular spin qubits by coordination chemistry
NATURE NANOTECHNOLOGY 4, 173-178 (2009) IF 26.309, CIT 55
17. Candini Andrea; Klyatskaya Svetlana; Ruben Mario; et al.
Graphene Spintronic Devices with Molecular Nanomagnets
NANO LETTERS 11, 2634-2639 (2011) IF 12.186
18. Taurino, R., Fabbri, E., Messori, M., Pilati, F., Pospiech, D., Synytska, A.
Facile preparation of superhydrophobic coatings by sol-gel processes
Journal of Colloid and Interface Science 325, 149-156 (2008) CIT 24
19. Candini, A; Lorusso, G; Troiani, F; Ghirri, A; Carretta, S; Santini, P; Amoretti, G; Muryn, C; Tuna, F; Timco, G; McInnes, EJJ; Winpenny, REP; Wernsdorfer, W; Affronte, M
Entanglement in Supramolecular Spin Systems of Two Weakly Coupled Antiferromagnetic Rings (Purple-Cr(7)Ni)
PHYSICAL REVIEW LETTERS 104, 037203 (2010) IF 7.621, CIT 19
20. Terzi F, C. Zanardi, B. Zanghini, L. Pigani, R. Seeber, J. Lukkari, T. Ääritalo, J. Kankare
Preparation and characterisation of a redox multilayer film containing Au nanoparticles
Journal of Physical Chemistry C 113, 4868-4874 (2009) IF 4.224, CIT 4
21. Vincetti L, F. Poli, S. Selleri
Confinement Loss and Nonlinearity Analysis of Air-Guiding Modified Honeycomb Photonic Bandgap Fibers
IEEE Photonic Technology Letters 16, 508-510 (2006) CIT 39
22. Zanardi C, F. Terzi, L. Pigani, A. Heras, A. Colina, J. Lopez-Palacios, R. Seeber
Development and characterisation of a novel composite electrode material consisting of poly(3,4-ethylenedioxythiophene) including Au nanoparticles.
Electrochimica Acta 53, 3916-3923 (2008) IF 3.325, CIT 8
23. Zanardi C, F. Terzi, R. Seeber
Composite electrode coatings in amperometric sensors. Effects of differently encapsulated gold nanoparticles in poly(3,4-ethylenedioxythiophene) system
Sensors and Actuators B – Chemical 148, 277–282 (2010) IF 3.083, CIT 3
24. Ferrari, E., Fabbri, P., Pilati, F.

- Solvent and substrate contributions to the formation of breath figure patterns in polystyrene films
Langmuir 27, 1874-1881 (2011) IF 4.268
25. Faqir M, G. Verzellesi, A. Chini, F. Fantini, F. Danesin, G. Meneghesso, E. Zanoni, C. Dua
Mechanisms of RF current collapse in AlGa_N-Ga_N high electron mobility transistors
IEEE Trans. on Device and Material Reliability 8, 240-247 (2008) CIT 8
 26. Martina V, K.Ionescu, L. Pigani, F. Terzi, A. Ulrici, C. Zanardi, R. Seeber
Development of an electronic tongue based on a PEDOT-modified voltammetric sensor
Analytical and Bioanalytical Chemistry 387, 2101 (2007) IF 3.480, CIT 15
 27. Padovani A, L. Larcher, D. Heh, G. Bersuker, V. Dellamarca, P. Pavan
Temperature Effects on Metal-Alumina-Nitride-Oxide-Silicon Memory Operations
APPLIED PHYSICS LETTERS 2235 – 2235 (2010) CIT 5
 28. Rajan S, A. Chini, M. H. Wong, J. S. Speck, U. K. Mishra
N-polar Ga_N/AlGa_N/Ga_N high electron mobility transistors
Journal of Applied Physics 102, 4 (2007) CIT 39
 29. Kalliakos, S; Rontani, M; Pellegrini, V; Garcia, CP; Pinczuk, A; Goldoni, G; Molinari, E; Pfeiffer, LN; West, KW
A molecular state of correlated electrons in a quantum dot
NATURE PHYSICS 4, 467-471 (2008) IF 15.491, CIT 22
 30. Ferretti, A; Baldacchini, C; Calzolari, A; Di Felice, R; Ruini, A; Molinari, E; Betti, MG
Mixing of electronic states in pentacene adsorption on copper
PHYSICAL REVIEW LETTERS 99, 046802 (2007) IF 7.328, CIT 73
 31. Ferrari, G; Goldoni, G; Bertoni, A; Cuoghi, G; Molinari, E
Magnetic States in Prismatic Core Multishell Nanowires
NANO LETTERS 9, 1631-1635 (2009) IF 9.991, CIT 10
 32. Prezzi D.; Varsano D.; Ruini A.; et al.
Optical properties of graphene nanoribbons: The role of many-body effects
PHYSICAL REVIEW B 77, 041404 (2008) CIT 34
 33. Barabas B., Caglioti L., Zucchi C., Maioli M., Gál E., Micskei K., Pályi G.
Violation of distribution symmetry in statistical evaluation of absolute enantioselective synthesis
Journal of Physical Chemistry B 111, 11506-11510 (2007) IF 3.603, CIT 14
 34. Giardinà C., Kurchan J., Peliti L
Direct evaluation of large-deviation functions
Physical Review Letters 96, 120603 (2006) IF 7.621, CIT 32
 35. Contucci P., Giardinà C., Giberti C., Parisi G., Vernia C.
Ultrametricity in the Edwards-Anderson model
Physical Review Letters 99, 057206 (2007) IF 7.621, CIT 13
 36. Bonettini S., Zanella R., Zanni L.

- A scaled gradient projection method for constrained image deblurring
Inverse Problems 25, 015002 (2009) IF 2.124, CIT 13
37. Buscemi F, Bordone P, Bertoni A.
Entanglement dynamics of electron-electron scattering in low-dimensional semiconductor systems
Phys. Rev. A 73, 052312 (2006) IF 3.047, CIT 25
 38. Cocchi M, Durante C., Grandi M., Lambertini P., Manzini D., Marchetti A
Simultaneous Determination of sugars and organic acids in aged vinegar and chemometric data analysis
Talanta 69, 1166-1175 (2006) IF 3.72, CIT 24
 39. Loris I, Bertero M., De Mol C., Zanella R., Zanni L.
Accelerating gradient projection methods for ℓ^1 -constrained signal recovery by steplength selection rules
Applied and Computational Harmonic Analysis 27, 247-254 (2009)
IF 3.144, CIT 10
 40. Zanella R., Boccacci P., Zanni L., Bertero M.
Efficient gradient projection methods for edge-preserving removal of Poisson noise
Inverse Problems 25, 045010 (2009) IF 2.124, CIT 11
 41. Zanni L., Serafini T., Zanghirati G.
Parallel software for training large scale support vector machines on multiprocessor systems
Journal of Machine Learning Research 7, 1467-1492 (2006) IF 2.949, CIT 27
 42. Sacchetti A.
Universal Critical Power for Nonlinear Schrödinger Equations with a Symmetric Double Well Potential
Physical Review Letters 103, 194101 (2009) IF 7.621, CIT 6
 43. Pedone A.; Malavasi G., Menziani M. C., et al.
FFSiOH: a new force field for silica polymorphs and their hydroxylated surfaces based on periodic B3LYP calculations
Chemistry of Materials 20, 2522-2531 (2008) IF 6.38, CIT 17
 44. Frabboni S; Gazzadi GC; Felisari L; et al.
Fabrication by electron beam induced deposition and transmission electron microscopic characterization of sub-10-nm freestanding Pt nanowires
APPLIED PHYSICS LETTERS 88, 2006 IF 3.8, CIT 15
 45. Gazzadi, GC; Angeli, E; Facci, P; Frabboni, S
Electrical characterization and Auger depth profiling of nanogap electrodes fabricated by I-2-assisted focused ion beam
APPLIED PHYSICS LETTERS 89 (2006) IF 3.8, CIT 15
 46. D'Addato, S; Grillo, V; Altieri, S; Tondi, R; Valeri, S; Frabboni, S
Structure and stability of nickel/nickel oxide core-shell nanoparticles
JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER 23 (2011)
 47. D. Prezzi, D. Varsano, A. Ruini, E. Molinari

Quantum dot states and optical excitations of edge-modulated graphene nanoribbons
Phys Rev B **84**, 041401 (2011)

48. J. Maultzsch, J; R. Pomraenke, S. Reich; E. Chang; D. Prezzi; A. Ruini, E. Molinari; MS. Strano; C. Thomsen; C. Lienau, C
Exciton binding energies in carbon nanotubes from two-photon photoluminescence
Phys Rev B **72**, 241402 (2005) (Cit 222)
49. D. Prezzi, D. Varsano, A. Ruini, A. Marini, E. Molinari
Optical properties of graphene nanoribbons: The role of many-body effects
Phys Rev B **77**, 041404 (2008) (cit 37)
50. M. Reguzzoni, M. Ferrario; S. Zapperi, M.C. Righi,
Onset of frictional slip by domain nucleation in adsorbed monolayers
PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA 107, 1311 (2011)

WP1

TITOLO:

Italiano: **Processi e fenomeni alla nanoscala**

Inglese: **Nanoscale phenomena and processes**

RESPONSABILE SCIENTIFICO:

Nome: **Sergio**

Cognome: **Valeri**

Titolo: prof. Ordinario

CV: allegato 1

ABSTRACT (max 300 parole):

Italiano: I nanosistemi possono costituire laboratori ineguagliati per l'esplorazione di fenomeni fisici nuovi. L'avanzamento delle tecnologie (su scala nano-, ma anche micro- e macro) può avvenire, di contro, solo attraverso la progettazione e il controllo della materia e dei materiali alla nanoscala.

In questo WP si utilizzano entrambi questi approcci per affrontare questioni di natura concettuale e pratica che possono contribuire a sviluppare tecnologie future ed emergenti, o anche tecnologie mature, in relazione alla loro sostenibilità. Aumentare le funzionalità di una singola nanostruttura o nano dispositivo, migliorare il controllo di proprietà di interfaccia quali attrito e usura, sviluppare nano catalizzatori ad alta efficienza, introdurre nuovi materiali e processi per applicazioni nel campo dell'energia, sono solo alcuni esempi di tali problemi. Si analizzeranno diversi fenomeni originati dalla nanostrutturazione per mezzo di una varietà di strumenti sperimentali e teorici per mettere in evidenza gli effetti del confinamento sulle proprietà fisiche di interesse. Uno degli obiettivi principali è la comprensione delle interazioni fondamentali alle superfici, dai primi stadi della formazione delle interfacce alla aggregazione di sistemi a bassa dimensionalità e dalla funzionalizzazione alla strutturazione di sistemi ibridi complessi.

Questa linea di ricerca comprende inoltre attività di nanofabbricazione con fasci ionici ed elettronici, e la loro caratterizzazione con microscopie e spettroscopie elettroniche. Allo scopo di prevedere fenomeni e soluzioni innovative faremo leva su un approccio combinato teorico e sperimentale. I ricercatori del WP hanno competenze di punta nei campi della fisica della materia e dei materiali nanostrutturati. Le competenze su nanofabbricazione, spettroscopie e microscopie a scansione di sonda, spettroscopie ad alta risoluzione energetica e spaziale, si accompagnano a competenze di tipo teorico-computazionale relative a metodi ab initio per lo studio di sistemi a molti corpi e per la simulazione delle spettroscopie. Le conoscenze di base offerte dal WP1 contribuiranno anche all'attività degli altri WP, favorendo una stretta integrazione di tutta la linea strategica. Il WP1 interagirà strettamente con il WP4, utilizzando i nuovi metodi sperimentali e teorici che esso svilupperà e offrendo un feedback sui relativi risultati.

Inglese: Nanoscale systems offer a unique laboratory to explore novel physical phenomena. At the same time, breakthroughs in a number of emerging technologies (at the nano-, but also at the micro- and macro- scale) require a firm grounding in understanding fundamental physical principles as well as a large effort to design and control matter and materials at the nanoscale.

In WP1 both approaches are used to address conceptual and practical questions that can contribute to future and emerging or mature technologies in terms of their sustainability. Increasing the functionalities of a single nanostructure or nanodevice, improving control of interface properties such as nanoscale friction and wear, developing high efficiency nanocatalysts, introducing new materials and processes for energy applications, are a few examples in this direction.

Different phenomena arising from material confinement at the nanoscale will be explored through a variety of experimental and theoretical tools in order to unravel the basic aspects in the interplay between the spatial confinement and the relevant physical properties. We aim at understanding fundamental interaction at surfaces from the early stages of interface formation to the assembly of low dimensional systems and from molecule functionalization to the preparation of hybrid systems. In addition, this research line includes activities devoted to fabrication of nanostructures with focused ion beam techniques, to their structural characterization by electron microscopy and spectroscopies.

To gain predictive understanding of nanoscale phenomena and to envisage innovative solutions, the research involves strategically both computational and experimental approaches. The researchers form a team of leading experts in the field of solid state physics and nano structured materials with expertise on one side in nano-fabrication, scanning-probe techniques, high resolution spectroscopic and functional characterization; on the other side in ab-initio approaches, many body methods, theoretical simulations of spectroscopies.

WP1 provides basic knowledge for others WPs, thus supporting a large integration within the strategic line. It also interacts closely with WP4 by taking advantage of, and providing feedback on, the novel experimental and computational methods that they will develop.

OBIETTIVI (max 150 parole)

Italiano:

- Sistemi 2D (superfici, interfacce, film ultrasottili) e 3D (es: nanocompositi) multifunzionali, loro preparazione, nanostrutturazione e caratterizzazione mediante strumentazioni e metodologie state-of-the-art, e loro integrazione in materiali e sistemi complessi ibridi (in collaborazione con WP2 e WP3);
- Punti e fili quantici e nanosistemi a base di carbonio, anche integrati in sistemi ibridi, nei quali i fenomeni quantistici, enfatizzati dalla ridotta dimensionalità, promettono strategie innovative di lungo termine per i dispositivi.
- Architetture e strategie bio-ispirate come pure dispositivi e architetture basate su componenti biologici (bio4nano). In parallelo si svilupperanno e utilizzeranno strumenti di tipo nanotecnologico, per studiare la materia biologica (nano4bio).
- Sviluppo a Modena di una infrastruttura regionale per l'imaging (microscopia TEM e a scansione) integrata nelle corrispondenti strutture europee (in collaborazione col WP4 per gli aspetti teorici e computazionali).
- Questo WP manterrà un ruolo di punta anche nella ricerca di interesse industriale della Rete ad Alta Tecnologia della Regione ER, per gli aspetti legati alle nanotecnologie e ai nano materiali di interesse per la sostenibilità ambientale ed energetica.

Inglese:

- Multifunctional 2D (surfaces, interfaces, ultrathin films) and 3D systems (e.g. nanocomposites) preparation, nanostructuring and characterization by state-of-

the-art techniques and methods, and their integration in hybrid complex systems (collaboration with WP2 and WP3).

- Quantum dots, wires and carbon-based nanosystems (also integrated in hybrid systems) where quantum phenomena emphasized by the reduced dimensionality offer promise for most innovative long-term device strategies.

- Architectures and strategies, as well as devices based on biological components (bio4nano). In parallel, nanotechnology tools will be developed and used to study biological matter (nano4bio).

- Set up in Modena of a regional infrastructure for microscopy and imaging, in close coordination with other institution in Emilia Romagna, to be integrated in the national and European infrastructures (cooperation with WP4 for theoretical and computational aspects).

- WP1 will also strengthen its leading role in industrial research within the High Technology network of regione Emilia Romagna with respect to nanotechnologies and nanomaterials for the environmental and energetic sustainability.

RICERCATORI A TEMPO PIENO:

PO: 6

PA: 4

RU: 8

(Elenchi nominali per fascia in allegato 2)

PERSONALE TECNICO STRUTTURATO

(elenco nominale in allegato 3)

PERSONALE DI RICERCA NON STRUTTURATO:

(Elenco nominale per categoria in allegato 4).

LABORATORI:

(Elenco in allegato 5)

PUBBLICAZIONI SCELTE:

1. Medintz, IL; Berti, L; Pons, T; Grimes, AF; English, DS; Alessandrini, A; Facci, P; Mattoussi

A reactive peptidic linker for self-assembling hybrid quantum dot-DNA bioconjugates H

NANO LETTERS 7, 1741-1748 (2007). IF 9.991

2. Ghirri, A; Corradini, V; Bellini, V; Biagi, R; del Pennino, U; De Renzi, V; Cezar, JC; Muryn, CA; Timco, GA; Winpenny, REP; and Affronte, M

Self-Assembled Monolayer of Cr₇Ni Molecular Nanomagnets by Sublimation

ACS NANO 5, 7090-7099 (2011). IF 9.865

3. M. Gonidec, R. Biagi, V. Corradini, F. Moro, V. De Renzi, U. Del Pennino, D. Summa, L. Muccioli, C. Zannoni, D. Amabilino, and J. Veciana

Surface supramolecular organization of a terbium (III) double-decker complex on graphite and its single molecule magnet behaviour

J. Am. Chem. Soc. 133, 6603-6612 (2011). IF 9.023

4. J. Sánchez-Barriga, J. Fink, V. Boni, I. Di Marco, J. Braun, J. Minár, A. Varykhalov, O. Rader, V. Bellini, F. Manghi, H. Ebert, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, O. Eriksson, W. Eberhardt, and H. A. Dürr
Strength of Correlation Effects in the Electronic Structure of Iron
Physical Review Letters **103**, 267203 (2009). IF 7.622
5. P. Luches, V. Bellini, S. Colonna, L. Di Giustino, F. Manghi, S. Valeri, and F. Boscherini
Iron oxidation, interfacial expansion, and buckling at the Fe/NiO(001) interface
PHYSICAL REVIEW LETTERS **96**, 106106 (2006). IF 7.328
6. M. Rosini and R. Magri
Surface Effects on the Atomic and Electronic Structure of Unpassivated GaAs Nanowires
ACS NANO **4**, 6021-6031 (2010). IF 7.493
7. A. Ghirri, V. Corradini, V. Bellini, R. Biagi, U. del Pennino, V. De Renzi, J. C. Cezar, C.A. Muryn, G.A. Timco, R. E. P. Winpenny, and M. Affronte
Self-assembled monolayer of Cr₇Ni molecular qubits by sublimation
ACS NANO **5**, 7090-7099 (2011). IF 7.493
8. A. Sacchetti
Universal Critical Power for Nonlinear Schrödinger Equations with a Symmetric Double Well Potential
PHYSICAL REVIEW LETTERS **103**, 194101 (2009). IF 7.622
9. C. Hogan, R. Magri, and R. Del Sole
Spontaneous Formation of Surface Antisite Defects in the Stabilization of the Sb-Rich GaSb(001) Surface
Physical Review Letters Volume 104, 157402 (2010). IF 7.622
10. S. D'Addato, V. Grillo, S. Altieri, S. Frabboni, F. Rossi, and S. Valeri
Assembly and Fine Analysis of Ni/MgO Core/Shell Nanoparticles
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C **115**, 14044-14049 (2011). IF 4.520
11. S. Benedetti, N. Nilius, P. Myrach, P. Torelli, G. Renaud, H.-J. Freund, and S. Valeri
Competition between polar and non-polar growth of MgO films on Au(111)
Journal of Physical Chemistry C **115**, 23043-23049 (2011). IF 4.52
12. S. Benedetti, N. Nilius, I. Valenti, P. Myrach, S. Valeri, and H.-J. Freund
Spontaneous oxidation of Mg atoms at defect sites in an MgO surface
J. Phys. Chem. C **115**, 3684-3687 (2011). IF 4.52
13. V. De Renzi, L. Lavagnino, V. Corradini, R. Biagi, M. Canepa, and U. del Pennino
Very low energy vibrational modes as a fingerprint of H-bond network formation: L-cysteine on Au(111)
J. OF PHYSICAL CHEMISTRY C **112**, 14439-14445 (2008). IF 4.524
14. R. Buzio, A. Bosca, S. Krol, D. Marchetto, S. Valeri, and U. Valbusa
Deformation and Adhesion of Elastomer Poly(dimethylsiloxane) Colloidal AFM Probes
Langmuir **23**, 9293-9302 (2007). IF 4.29

15. P. Torelli, S. Benedetti, P. Luches, S. Valeri, E. Annese, L. Giordano, and G. Pacchioni
X-ray photoemission study of the charge state of Au nanoparticles on thin MgO/Fe(001) films
J. Phys. Chem. C **113**, 19957-19965 (2009). IF 4.22
16. B. Barabas, L. Caglioti, C. Zucchi, M. Maioli, K. Micskei, and G. Palyi
Violation of Distribution Symmetry in Statistical Evaluation of Absolute Enantioselective Synthesis
Journal of Physical Chemistry B **111**, 11506-11510 (2007). IF 4.115
17. F. Moro, V. Corradini, M. Evangelisti, R. Biagi, V. De Renzi, U. del Pennino, JC Cezar, R. Inglis, CJ Milios, and EK Brechin
Addressing the magnetic properties of sub-monolayers of single-molecule magnets by X-ray magnetic circular dichroism
NANOSCALE 2, 2698-2703 (2010). IF 4.109
18. F. Buscemi, P. Bordone, and A. Bertoni
On demand entanglement in double quantum dots via coherent carrier scattering
New J. Phys. **13**, 013023-1/19 (2011). IF 3.849
19. S. Frabboni; GC Gazzadi, L. Felisari; et al.
Fabrication by electron beam induced deposition and transmission electron microscopic characterization of sub-10-nm freestanding Pt nanowires
APPLIED PHYSICS LETTERS **88**, 213116 (2006). IF 3.8
20. A. Franchini; V. Bortolani; and RF Wallis
Interaction of an external impurity with the surface intrinsic mode in a Heisenberg chain
PHYSICAL REVIEW B **73**, 054412 (2006). IF 3.772

WP2

TITOLO:

Italiano: **Nanosistemi molecolari e materiali funzionali**

Inglese: **Molecular-based nanosystems and functional materials**

RESPONSABILE SCIENTIFICO:

Nome: **Andrea**

Cognome: **Cornia**

Titolo: prof. Associato

CV: allegato 1

ABSTRACT (max 300 parole):

Italiano: Questo WP riguarda la realizzazione di materiali e nanosistemi attraverso una strategia bottom-up nella quale componenti molecolari sono progettati, sintetizzati e utilizzati come tali o come precursori per il prodotto finale. Grazie alla loro composizione e struttura definita, le molecole offrono un controllo ineguagliato sulla materia a diverse scale, compresa la nanoscala. A seconda delle caratteristiche richieste per il prodotto finale, verranno seguiti tre diversi approcci. In primo luogo, solidi molecolari verranno assemblati grazie a forze intermolecolari deboli in modo che la natura molecolare dei precursori sia direttamente trasferita nel prodotto finale: ne risulteranno proprietà di flessibilità, peso, trasparenza e versatilità chimica che normalmente non si riescono a ottenere con materiali tradizionali basati su metalli o su ossidi. In alternativa, aggregati molecolari a bassa dimensionalità o anche singole molecole verranno integrate in dispositivi non convenzionali come superfici funzionalizzate per sensori e altri componenti elettronici miniaturizzati. Infine, componenti molecolari saranno utilizzati come precursori di solidi non molecolari, concorrendo a determinarne la struttura e la funzionalità.

Questo WP coordina le competenze di 15 ricercatori in un unico sforzo per lo sviluppo di materiali e nanosistemi funzionali a base molecolare. Tutti gli obiettivi di ricerca (vedi sotto) sono molto promettenti in termini di sostenibilità e hanno rilevanza sia per la ricerca fondamentale che per le applicazioni. Il gruppo di ricerca ha esperienza e tradizione nella sintesi chimica (compresa sintesi organica fine, chimica di coordinazione, chimica supramolecolare, sintesi in stato solido, ecc.). Inoltre esso padroneggia molte tecniche di caratterizzazione essenziali per la chimica molecolare sia allo stato solido che in soluzione (diffrazione, spettroscopie, microscopie, analisi termica, ecc.).

Inglese: This WP focuses on the realization of materials and nanosystems following a bottom-up route in which molecularly defined components are designed, synthesized and used as such or as precursors to the final product. Owing to their defined composition and structure, molecules offer an unparalleled level of control upon matter at different scales, including the nanoscale. Depending on the characteristics of the final product, one of three different routes will be followed. In a first approach, molecular solids will be assembled taking advantage of weak intermolecular forces. In this case, the molecular nature of the precursors is directly transferred into the final product, whose attributes in terms of flexibility, weight, transparency and chemical versatility are normally unattainable with traditional materials based on metals or on oxides. Alternatively, low-dimensional molecular arrays or even single molecules will be integrated into unconventional devices, like functionalized surfaces for sensing and miniaturized electronic components. Finally,

in the broadest conception of molecular-based systems, molecular building blocks will serve as precursors to non-molecular solids. Here, the properties of the precursors and the chemical reactions occurring during the fabrication procedure concur to determine the structure and functionality of the resulting material.

This WP coordinates the expertise of 15 researchers of our University into a unique effort toward molecular-based functional materials and nanosystems. All targets of investigation (see Objectives) hold great promises for a sustainable social and economic development and are of relevance in both fundamental research and technological applications. The team behind this WP has a well-documented tradition in all aspects of molecular synthesis (fine organic synthesis, coordination chemistry, supramolecular chemistry, solid-state synthesis, etc.). In addition, it masters many characterization techniques which are regarded as key investigation tools in molecular chemistry, covering both solid-state and solution behaviors (diffraction, spectroscopies, microscopies, thermal analysis, etc.).

OBIETTIVI (max 150 parole)

Italiano: Le attività proposte hanno come obiettivo la sintesi e la caratterizzazione di materiale e nanosistemi a base molecolare sia totalmente nuovi sia ispirati alla natura, progettandoli in modo da ottenere funzionalità specifiche derivanti dalle loro proprietà elettriche, magnetiche, meccaniche e chimiche. Tra questi: materiali organici per la conversione energetica, materiali ceramici e vetri bioattivi, catalizzatori “verdi” e nanosistemi ibridi con funzionalità avanzate come il data storage magnetico a livello molecolare. Di questi materiali e nanosistemi prevediamo potenziali applicazioni nelle tecnologie sostenibili legate alle energie rinnovabili, alla salute, alla chimica verde e all’elettronica post-silicio, creando così un legame naturale con il WP3 (Dispositivi intelligenti). La stretta collaborazione con il WP4 (Metodi per l’imaging e il modeling multiscala) e con il WP1 (Fenomeni e processi alla nanoscala) si rivelerà importante per la gestione degli aspetti più complessi del design molecolare, della caratterizzazione e del modelling molecolare, e per assicurare una contaminazione proficua tra le diverse aree scientifiche.

Inglese: The proposed activity targets the synthesis and characterization of both totally new and nature-inspired molecular-based materials and nanosystems, designed to exhibit specific functions derived from their electrical, magnetic, mechanical and chemical properties. These include organic materials for energy conversion, bioactive ceramics and glasses, green catalysts, and hybrid nanosystems exhibiting cutting-edge functions, such as magnetic data storage at the molecular level. For these materials and nanosystems we foresee potential applications in sustainable technologies related to renewable energies, healthcare, green chemistry and post-silicon electronics, thus establishing a natural link with WP3 (Smart devices). Close interaction with WP4 (Methods for imaging and multiscale modeling) and with WP1 (Nanoscale phenomena and processes) will also be instrumental to handle the most demanding aspects of molecular design, material characterization and modelling, and to ensure cross-fertilization between different scientific areas.

RICERCATORI A TEMPO PIENO:

PO: 3

PA: 6

RU: 6

(Elenchi nominali per fascia in allegato 2)

PERSONALE TECNICO STRUTTURATO

(elenco nominale in allegato 3)

PERSONALE DI RICERCA NON STRUTTURATO:

(Elenco nominale per categoria in allegato 4).

LABORATORI:

(elenco in allegato 5)

PUBBLICAZIONI SELEZIONATE:

1. M. Mannini, F. Pineider, C. Danieli, F. Totti, L. Sorace, Ph. Saintavit, M.-A. Arrio, E. Otero, L. Joly, J. C. Cesar, A. Cornia, and R. Sessoli
Quantum Tunneling of the Magnetization in a Monolayer of Oriented Single Molecule Magnets
Nature **468**, 417-421 (2010). IF 34.48
2. M. Mannini, F. Pineider, Ph. Saintavit, C. Danieli, E. Otero, C. Sciancalepore, A. M. Talarico, M.-A. Arrio, A. Cornia, D. Gatteschi, and R. Sessoli
Magnetic Memory of a Single-molecule Quantum Magnet Wired to a Gold Surface
Nat. Mater. **8**, 194-197 (2009). (Highlighted on Nat. Mater. 8 (2009) 165 by H. Wende). IF 29.50
3. A. Cornia, M. Mannini, Ph. Saintavit, and R. Sessoli
Chemical Strategies and Characterization Tools for the Organization of Single Molecule Magnets on Surfaces
Chem. Soc. Rev. **40**, 3076-3091 (2011). IF 20.09
4. L. Bogani, C. Danieli, E. Biavardi, N. Bendiab, A.-L. Barra, E. Dalcanale, W. Wernsdorfer, and A. Cornia
Single-Molecule-Magnet Carbon-Nanotube Hybrids
Angew. Chem. **121**, 760-764 (2009); Angew. Chem. Int. Ed. **48**, 746-750 (2009). IF 11.83
5. L. Bogani, L. Cavigli, M. Gurioli, R. L. Novak, M. Mannini, A. Caneschi, F. Pineider, R. Sessoli, M. Clemente-León, E. Coronado, A. Cornia, and D. Gatteschi
Magneto-optical Investigations of Nanostructured Materials Based on Single Molecule Magnets Monitor Strong Environmental Effects
Adv. Mater. **19**, 3906-3911 (2007). IF 8.38
6. M. J. Rodriguez-Douton, M. Mannini, L. Armelao, A.-L. Barra, E. Tancini, R. Sessoli, and A. Cornia
One-step Covalent Grafting of Fe₄ Single-Molecule Magnet Monolayers on Gold
Chem. Commun. **47**, 1467-1469 (2011). IF 5.787
7. A. J. Salinas, S. Shruti, G. Malavasi, L. Menabue, and M. Vallet-Regí.
Substitutions of Cerium, Gallium and Zinc in Ordered Mesoporous Bioactive Glasses
Acta Biomaterialia **7**, 3452-3458 (2011). IF 4.82
8. V. Sgobba, A. Troeger, R. Cagnoli, A. Mateo-Alonso, M. Prato, F. Parenti, A. Mucci, L. Schenetti, and D. M. Guldi

Electrostatic Layer-by-Layer Construction and Characterization of Photoelectrochemical Solar Cells Based on Water Soluble Polythiophenes and Carbon Nanotubes

J. Mater. Chem. **19**, 4319–4324 (2009). IF 4.80

9. E. Ferrari, G. Lusvardi, V. Aina, G. Malavasi, F. Fantini, C. Morterra, F. Pignedoli, M. Saladini, and L. Menabue

The Role of Coordination Chemistry in the Development of Innovative Gallium-based Bioceramics: the Case of Curcumin

J. Mater. Chem. **21**, 5027–5037 (2011). IF 4.80

10. R. Cagnoli, M. Lanzi, E. Libertini, A. Mucci, L. Paganin, F. Parenti, L. Preti, and L. Schenetti

Organic- and Water-Soluble Aminoalkylsulfanyl Polythiophenes

Macromolecules **41**, 3785–3792 (2008). IF 4.41

11. A. Mucci, F. Parenti, R. Cagnoli, R. Benassi, A. Passalacqua, L. Preti, L. Schenetti

One-pot synthesis of symmetric octithiophenes from asymmetric β -alkylsulfanyl bithiophenes

Macromolecules **39**, 8293–8302 (2006). IF 4.41

12. G. Lusvardi, G. Malavasi, L. Menabue, V. Aina, L. Bertinetti, G. Cerrato, C. Morterra

Bioactive glasses containing Au nano-particles: structural, morphological and physico-chemical characterisation

Langmuir **26**, 10303–10314 (2010). IF 4.268

13. C. Bruno, F. Paolucci, M. Marcaccio, R. Benassi, C. Fontanesi, A. Mucci, F. Parenti, L. Preti, L. Schenetti, and D. Vanossi

An Experimental and Theoretical Study of the p- and n-Doped States of Alkylsulfanyl Octithiophenes

J. Phys. Chem. B **114**, 8585–8592 (2010). IF 3.47

14. F. Roncaglia, C. V. Stevens, F. Ghelfi, M. Van der Steen, M. Pattarozzi, and L. De Buyck

A New Synthetic Route to Tyromycin A and Its Analogue from Renewable Resources

Tetrahedron **65**, 1481–1487 (2009). IF 3.22

15. R. Casolari, F. Felluga, V. Frenna, F. Ghelfi, U. M. Pagnoni, A. F. Parsons, and D. Spinelli

A Green Way to γ -Lactams through a Copper Catalyzed ARGET-ATRC in Ethanol and in the Presence of Ascorbic Acid

Tetrahedron **67**, 408–416 (2011). (Questo lavoro ha meritato la copertina del fascicolo in cui è uscito). IF 3.22

16. F. Parenti, P. Morvillo, E. Bobeico, R. Diana, M. Lanzi, C. Fontanesi, F. Tassinari, L. Schenetti, and A. Mucci

(Alkylsulfanyl)bithiophene-alt-Fluorene: π -Conjugated Polymers for Organic Solar Cells

Eur. J. Org. Chem. 5659–5667 (2011). IF 3.20

17. E. Ferrari, S. Lazzari, G. Marverti, F. Pignedoli, and M. Saladini

Synthesis and Characterization of New Curcumin Derivatives: an In-vitro Study on Their Cytotoxic Activity

Bioorg. Med. Chem. **17**, 3043-3052 (2009). IF 2.98

18. F. Pignedoli, F. Zobi, M. Saladini, and R. Alberto

New ^{99m}Tc(I) and Re(I) Curcumin Derivatives for Molecular Imaging

Nucl. Med. Biol. **37**, 683 (2010). IF 2.62

19. M. Caselli, E. Ferrari, C. Imbriano, F. Pignedoli, M. Saladini, and G. Ponterini

Probing Solute-Solvent Hydrogen Bonding with Fluorescent Water-soluble Curcuminoids

J. Photochem Photobiol., A: Chem. **21**, 115-124(2010). IF 2.55

20. M. Bregoli, F. Felluga, V. Frenna, F. Ghelfi, U. M. Pagnoni, A. F. Parsons, G. Petrillo, and D. Spinelli

Synthesis of 4-(Chloromethyl)-3-alkyl-1-RSO₂-1H-pyrrol-2(5H)-ones, using a Sequential ATRC/[1,2]-elimination, from 2,2-Dichloro-N-allyl-N-RSO₂-amides.

Synthesis 1267-1278 (2011). IF 2.260

WP3:

TITOLO:

Italiano: **Dispositivi intelligenti**

Inglese: **Smart devices**

RESPONSABILE SCIENTIFICO:

Nome: **Paolo**

Cognome: **Pavan**

Titolo: prof. Ordinario

CV: allegato 1

ABSTRACT (max 300 parole):

Italiano: Lo sviluppo scientifico degli ultimi decenni, relativo allo sviluppo nuovi materiali ed alle tecniche di caratterizzazione a livello nanometrico, rende oggi possibile la realizzazione di nuovi "dispositivi intelligenti" in grado di apportare significativi miglioramenti in diversi ambiti tecnologici, ed in particolare nel settore della salute e della sicurezza ambientale e alimentare. Le attività di questo WP saranno orientate all'integrazione dei materiali nanostrutturati sviluppati nei WP1 e WP2 in questi "dispositivi intelligenti" (sensori, attuatori, ...). Tutte le competenze presenti nel WP saranno impiegate sinergicamente per l'ottimizzazione di tutti gli stadi realizzativi del dispositivo, che vanno dalla scelta del materiale più adatto alla sua realizzazione su scala reale, alla verifica della sua funzionalità e alla validazione delle risposte. Per quanto descritto, è chiaro che il dispositivo nel suo complesso può essere realizzato ed ottimizzato solo integrando competenze specifiche e interdisciplinari. Il gruppo di ricercatori di questo WP si focalizza sulla realizzazione dei dispositivi, ivi compresa la fabbricazione di dispositivi su scala nano basati su EBL e/o FIB (Affronte), e dei circuiti elettronici necessari a raccogliere, interpretare e trasmettere anche in remoto i segnali nella forma opportuna (Pavan, Zoboli, Chini, Vincetti), e sulla validazione e caratterizzazione metrologica dei dispositivi attraverso l'analisi delle risposte di dimostratori (Pigani, Rovati, Seeber, Zanardi). La manipolazione, caratterizzazione e rivelazione dei segnali anche ottici e elettrochimici dei componenti e delle architetture molecolari è pure assicurata (Affronte, Brunetti, Fabbri, Nannarone, Pasquali, Pigani, Pilati, Rovati, Seeber e Zanardi). La presenza di competenze nel settore bio- (Rossini) fornirà le competenze necessarie nella fase di progettazione di dispositivi per applicazioni nel settore biomedicale o alimentare. Unendo le competenze di tutti i ricercatori del WP sarà possibile, inoltre, studiare tutti gli aspetti legati al trattamento dell'informazione, attraverso la fattiva interazione con il WP4.

Inglese: The very recent scientific development of new materials and of new characterization techniques at the nanoscale is now making it possible to realize novel smart devices, potentially suitable to improve several technological areas, particularly concerning health and food and environmental safety. The activities of this WP will be mainly oriented to the integration of nanostructured materials, developed in WP1 and WP2, in these "smart devices" (sensors, actuators, ..). The different expertise present in the WP will synergistically work for the optimization of all stages up to the final realization of the device; they will range from the proper

engineering of the material, to the definition of sensor performances when used in the analysis of real matrices. As described, it is clear that the device, as a whole, can be only realised thanks to the coexistence and collaboration of specific and interdisciplinary skills. The group of researchers in this WP will focus on the realization of devices, including fabrication of nanodevices via EBL or FIB (Affronte) and of the interconnects necessary to properly collect, interpret and transmit signals from a remote location (Pavan, Zoboli, Chini, Vincetti), and on the validation and metrological characterization of the realized devices, through the analysis of the demonstrator responses (Pigani, Rovati, Seeber, Zanardi). The processing and characterization of devices, particularly their optical and electrochemical response and the corresponding signal detection, are also ensured (Affronte, Brunetti, Fabbri, Nannarone, Pasquali, Pigani, Pilati, Seeber and Zanardi); the biological expertise (Rossini) may prove useful for the design of devices exploitable in biomedical or food contexts. By combining the skills of all WP researchers, it will also be possible to improve information processing aspects in close collaboration with WP4.

OBIETTIVI (max 150 parole)

Italiano:

Le attività proposte si focalizzeranno su alcune tematiche sinergiche con gli altri WP:

-Ingegnerizzazione di materiali: Ottimizzazione delle condizioni di sintesi dei materiali o delle condizioni di crescita/preparazione di dispositivi basati su interfacce tra materiali diversi in relazione alla loro risposta

-Sensori ottici: Analisi, progettazione e realizzazione di sensori intrinseci ed estrinseci in fibra ottica e micro-ottica, basati su spettroscopia diretta ad assorbimento e a quenching della luminescenza o trasduzione mediata. Dispositivi a cristallo fotonico. Tecniche sensibili in superficie come risonanza plasmonica superficiale (SPR).

-Memorie elettroniche: Analisi di nano-celle di memoria con Floating gate (NOR e NAND), NROM, PCM.

-Sensori elettrochimici: Analisi, progettazione e realizzazione di sensori amperometrici applicabili per il controllo di processo on-line e at-line. L'elemento attivo del dispositivo sarà costituito da una superficie elettrodica opportunamente modificata con polimeri conduttori, nanoparticelle metalliche e di ossidi metalli, grafene, elementi biologici (enzimi e omologhi del DNA).

-Nanodispositivi spintronici basati su grafene e/o nanomagnetici molecolari

Inglese:

The proposed activities will focus, in synergy with the other WPs, on:

- Materials engineerization: Optimization of materials synthesis condition or of growth/preparation conditions of devices based on different materials

- Optical sensors: analysis, design and realization of intrinsic and extrinsic fiber optic and micro-optic sensors , based on absorption spectroscopy, luminescence quenching or mediated transduction.

Photonic crystal devices. Surface-sensitive techniques such as Surface Plasmonic Resonance (SPR).

- Electronic memories: Analysis of floating-gate memory nano-cells (NOR and NAND), NROM, PCM.

- Electrochemical sensors: analysis, design and fabrication of amperometric sensors for on-line and at-line process control. The active element of such device will consist in a electrodic surface, modified by way of conductive polymers, metallic and metal-oxide nanoparticles, graphene, biological elements (enzymes and DNA-homologues).
- Graphene- and/or molecular-magnets-based spintronic nanodevices.

RICERCATORI A TEMPO PIENO:

PO: 6

PA: 3

RU: 6

(Elenchi nominali per fascia in allegato 2)

PERSONALE TECNICO STRUTTURATO

(Elenco nominale in allegato 3)

PERSONALE DI RICERCA NON STRUTTURATO:

(Elenco nominale per categoria in allegato 4).

LABORATORI:

(Elenco in allegato 5)

PUBBLICAZIONI

1. G.A. Timco, S. Carretta, F. Troiani, et al.
Engineering the coupling between molecular spin qubits by coordination chemistry
NATURE NANOTECHNOLOGY **4**, 173-178 (2009). IF 30.324
2. A. Candini, S. Klyatskaya, M. Ruben, et al.
Graphene Spintronic Devices with Molecular Nanomagnets
NANO LETTERS **11**, 2634-2639 (2011). IF 12.219
3. F. Troiani, A. Ghirri, M. Affronte, et al.
Molecular engineering of antiferromagnetic rings for quantum computation
PHYSICAL REVIEW LETTERS **94**, 207208 (2005). IF 7.622
4. F. Terzi, C. Zanardi, B. Zanghini, L. Pigani, R. Seeber, J. Lukkari, T. Ääritalo, and J. Kankare
Preparation and characterisation of a redox multilayer film containing Au nanoparticles
Journal of Physical Chemistry C **113**, 4868-4874 (2009). IF 4.524
5. L. Serkovic Loli, H. Hamoudi, J. Gayone, M. Martiarena, E. Sanchez, O. Grizzi, L. Pasquali, S. Nannarone, B. Doyle, C. Dablemont, and V. Esaulov
Growth of N,N'-bis(1-ethylpropyl)-perylene-3,4,9,10-tetracarboxdiimide films on Ag (111)
The Journal of Physical Chemistry C **113**, 17866-17875 (2009). IF 4.524
6. L. Pigani, G. Foca, K. Ionescu, V. Martina, A. Ulrici, F. Terzi, M. Vignali, C. Zanardi, and R. Seeber
Amperometric sensors based on poly(3,4-ethylenedioxythiophene)-modified electrodes: Discrimination of white wines

- Anal. Chim. Acta **614**, 213-222 (2008). IF 4.311
7. L. Pigani, G. Foca, A. Ulrici, K. Ionescu, V. Martina, F. Terzi, M. Vignali, C. Zanardi, and R. Seeber
Classification of Red Wines by Chemometric Analysis of Voltammetric Signals from Pedot-Modified Electrodes
Anal. Chim. Acta **643**, 67-73 (2009). IF 4.311
8. E. Ferrari, P. Fabbri, and F. Pilati
Solvent and substrate contributions to the formation of breath figure patterns in polystyrene films
Langmuir **27**, 1874-1881 (2011). IF 4.269
9. G.L. Sala, M. Bellocci, G.P. Rossini
The cytotoxicity pathway triggered by palytoxin involves a change in the cellular pool of stress response proteins”
Chem. Res. Toxicol. **22**, 2009-2016 (2009). IF 4.148
10. G.L. Sala, G. Ronzitti, M. Sasaki, H. Fuwa, T. Yasumoto, A. Bigiani, G.P. Rossini
Proteomic analysis reveals multiple patterns of response in cells exposed to a toxin mixture
Chem. Res. Toxicol. **22**, 1077-1085 (2009). IF 4.148
11. A. Padovani, L. Larcher, D. Heh, G. Bersuker, V. Dellamarca, and P. Pavan
Temperature Effects on Metal-Alumina-Nitride-Oxide-Silicon Memory Operations
APPLIED PHYSICS LETTERS **96**, 223505 (2010). IF 3.841
12. L. Vincetti and V. Setti
Waveguiding mechanism in tube lattice fibers
Optics Express **18**, 23133-23146 (2010). IF 3.753
13. L. Rovati and S. Cattini
Zero-field readout electronics for planar fluxgate sensors without compensation coil
IEEE Transactions on Industrial Electronics **59**, art. no. 5740339, 571-578 (2012). IF 3.439
14. M. Bellocci, G. Ronzitti, A. Milandri, N. Melchiorre, C. Grillo, R. Poletti, T. Yasumoto, and G.P. Rossini
A cytolytic assay for the measurement of palytoxin based on a cultured monolayer cell line
Anal. Biochem. **374**, 48-55 (2008). IF 3.236
15. L. Rovati, S. Cattini, N. Zambelli, F. Viola, and G. Staurenghi
In-vivo diffusing-wave-spectroscopy measurements of the ocular fundus
Optics Express **15**, 4030-4038 (2007). IF 3.278
16. A. Padovani, L. Larcher, and P. Pavan
Hole Distributions in Erased NROM Devices: profiling method and effects on reliability
IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES **55**, 343 – 348 (2008). IF 2.267
17. M. Rudan, F. Giovanardi, E. Piccinini, F. Buscemi, R. Brunetti, and C. Jacoboni

Voltage snap-back in amorphous-GST memory devices: transport model and validation

IEEE Transactions on Electron Devices **58**, 4361 – 4369 (2011). IF 2.267

18. S. Rajan, A. Chini, M.H. Wong, J.S. Speck, and U.K. Mishra

N-polar GaN/AlGaN/GaN high electron mobility transistors

Journal of Applied Physics **102**, No. 4 (2007). IF 2.079

19. L. Rovati, P. Fabbri, L. Ferrari, and F. Pilati

Construction and evaluation of a disposable pH sensor based on a large core plastic optical fiber

Review of Scientific Instruments **82**, 023106 (2011). IF 1.601

20. M. Ghahari, P. Fabbri, T. Ebadzadeh, R. Aghababazadeh, F. Pilati, and F.A. Hesari

Synthesis of photoluminescent core-shell silica particles by sacrificial polymer shell method

Nano **5**, 221-229 (2010). IF 1.106

WP4:

TITOLO:

Italiano: **Metodi per l'imaging e il modelling multiscala**

Inglese: **Methods for imaging and multiscale modeling**

RESPONSABILE SCIENTIFICO:

Nome: **Luca**

Cognome: **Zanni**

Titolo: prof. Ordinario

CV: allegato 1

ABSTRACT (max 300 parole):

Italiano: Questo WP ha carattere trasversale rispetto agli altri, e affronta lo sviluppo di nuovi metodi per la modellizzazione dei nanosistemi e per i problemi di imaging studiati nella linea strategica.

Le nanoscienze e le tecnologie emergenti spesso richiedono di trattare efficacemente problemi che coinvolgono scale multiple. Gli approcci standard in generale non sono in grado di trattare tutte le scale spaziali e temporali coinvolte e il grande numero di variabili necessario. Qui ci proponiamo di migliorare, mediante approcci multiscala, le metodologie di base per la modellizzazione dei sistemi fisici, chimici anche ibridi di interesse per gli altri WP.

Si rivolgerà poi attenzione speciale allo studio di tecniche di signal e image processing. Si svilupperanno in particolare metodi per l'imaging nella microscopia (microscopia elettronica, scanning probe) e tecniche di deconvoluzione e denoising per migliorare il processo di ricostruzione dell'immagine in termini di accuratezza e/o tempo di calcolo. A questo scopo si analizzeranno diversi aspetti della modellizzazione del processo di ricostruzione dell'immagine: le formulazioni statistiche e la malposizione del problema inverso, la regolarizzazione del problema malposto, i problemi di ottimizzazione negli approcci di regolarizzazione e i corrispondenti metodi numerici. Inoltre, per gli algoritmi di imaging proposti si svilupperanno implementazioni parallele capaci di sfruttare appieno i calcolatori ad alte prestazioni di ultima generazione. Infine, mediante la collaborazione con i laboratori del Centro S3, tali sviluppi teorico-computazionali saranno integrati nelle tecniche sperimentali più avanzate di microscopia elettronica in trasmissione, ricevendo un feedback diretto per la loro validazione.

Tutto questo consentirà di mettere a punto e testare metodologie di frontiera nei settori dell'imaging, della microscopia elettronica e del calcolo scientifico ad alte prestazioni, che potranno valorizzare il ruolo dell'Ateneo all'interno delle collaborazioni con i network regionali, nazionali e internazionali attivi in queste aree.

Inglese: This WP addresses the development of new methods for modelling the nanosystems and for solving the imaging problems that are of relevance to the strategic line.

Research activities in the area of nano- and emerging technologies often need effective methodologies to tackle problems involving multiple scales. For such problems, standard approaches are inadequate to treat the full range of space/time scales and the large number of variables that are involved. By exploiting a multiscale

approach, we aim at improving the basic methodologies for modelling the physical, chemical, and hybrid systems of interest for all WPs.

Special attention will be devoted to signal and image processing techniques. We will focus on imaging methodologies in microscopy (e.g., electron microscopy, scanning probes) and we will develop deconvolution and denoising techniques to enhance the imaging process in terms of reconstruction accuracy and/or computational time. To this end, several modelling issues in the image reconstruction process will be analysed: the statistical formulations and the ill-posedness of the inverse problem, the regularization of the ill-posed problem, the minimization problems arising from the regularization approaches and the corresponding numerical methods. Furthermore, the parallel implementation of the considered imaging algorithms will be developed to fully exploit the modern high performance computing systems. The above theoretical and computational results will be validated by means of their integration into electron microscopy experimental techniques exploited at the laboratories of the S3 Center.

These activities will enable to design and test challenging methodologies in the imaging, electron microscopy and high performance scientific computing areas, by enhancing the role of the University within the regional, national and international networks working in these areas.

OBIETTIVI (max 150 parole)

Italiano: Fornire un robusto supporto teorico-computazionale per sviluppare e ottimizzare le metodologie di modelling multiscala e di imaging necessarie alla linea di ricerca. Gli obiettivi principali riguarderanno:

- Analisi dei dati multivariate/multiway e ottimizzazione di strumenti simulativi computazionali per la comprensione di sistemi e processi complessi.
- Progettazione di modelli matematici e metodi numerici per problemi di imaging rilevanti in microscopia elettronica; sviluppo di una libreria software per problemi di imaging di larga scala su architetture di calcolo ad alte prestazioni.
- Integrazione di processi quantistici ab initio e semiempirici con schemi di continuo e di dinamica molecolare per calcolare le proprietà di stato fondamentale, le eccitazioni e il trasporto di strutture complesse e dispositivi; sviluppo dei relativi codici open source.
- Sviluppo a Modena di infrastrutture regionali, integrate nelle infrastrutture nazionali ed europee, per l'imaging e la microscopia e per il settore del calcolo scientifico ad alte prestazioni.

Inglese: Provide a robust theoretical and computational support for developing and optimizing the multiscale modelling and imaging methodologies involved in the research line. The main goals will concern

- Multivariate/multiway data analysis and optimization of computational simulation tools to understand complex systems and processes.
- Design of mathematical models and numerical methods for imaging problems arising in electron microscopy; design of a software library suited for solving large scale imaging problems on high performance computing architectures.
- Integration of ab-initio and semiempirical quantum approaches with continuum schemes to calculate ground state, excitations and transport properties of complex structures and devices; development of relevant open-source codes.
- Set up in Modena of regional infrastructures for imaging and microscopy and for high performance scientific computing, in close coordination with other national and European infrastructures.

RICERCATORI A TEMPO PIENO:

PO: 6

PA: 4

RU: 8

(Elenchi nominali per fascia in allegato 2)

PERSONALE TECNICO STRUTTURATO

(Elenco nominale in allegato 3)

PERSONALE DI RICERCA NON STRUTTURATO:

(Elenco nominale per categoria in allegato 4).

LABORATORI:

(Elenco in allegato 5)

PUBBLICAZIONI

1. Bonettini, S; Zanella, R; Zanni, L
A scaled gradient projection method for constrained image deblurring
INVERSE PROBLEMS **25**, 015002 (2009). IF 2.124
2. Cocchi, M; Durante, C; Grandi, M; Lambertini, P; Manzini, D; Marchetti, A
Simultaneous Determination of sugars and organic acids in aged vinegar and chemometric data analysis
TALANTA **69**, 1166-1175 (2006). IF 3.72
3. Conti, M; Gatti, S; Pata, V
Uniform decay properties of linear volterra integro-differential equations
MATHEMATICAL MODELS AND METHODS IN APPLIED SCIENCES **18**, 21-45 (2008). IF 1.953
4. Contucci, P; Giardinà, C; Giberti, C; Parisi, G; Vernia, C
Ultrametricity in the Edwards-Anderson model
PHYSICAL REVIEW LETTERS **99**, 057206 (2007). IF 7.621
5. Ferrari, G; Goldoni, G; Bertoni, A; Cuoghi, G; Molinari, E
Magnetic States in Prismatic Core Multishell Nanowires
NANO LETTERS **9**, 1631-1635 (2009). IF 9.991
6. Ferretti, A; Baldacchini, C; Calzolari, A; Di Felice, R; Ruini, A; Molinari, E; Betti, MG
Mixing of electronic states in pentacene adsorption on copper
PHYSICAL REVIEW LETTERS **99**, 046802 (2007). IF 7.328
7. Giardinà, C; Kurchan, J; Peliti, L
Direct evaluation of large-deviation functions
PHYSICAL REVIEW LETTERS **96**, 120603 (2006). IF 7.621
8. Kalliakos, S; Rontani, M; Pellegrini, V; Garcia, CP; Pinczuk, A; Goldoni, G; Molinari, E; Pfeiffer, LN; West, KW
A molecular state of correlated electrons in a quantum dot
NATURE PHYSICS **4**, 467-471 (2008). IF 15.491

9. Loris, I; Bertero, M; De Mol, C; Zanella, R; Zanni, L
Accelerating gradient projection methods for ℓ_1 -constrained signal recovery by steplength selection rules
APPLIED AND COMPUTATIONAL HARMONIC ANALYSIS **27**, 247-254 (2009). IF 3.144
10. Pedone, A; Charpentier, T; Menziani, MC
Multinuclear NMR of CaSiO(3) glass: simulation from first-principles
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS **12**, 6054-6066 (2010). IF 3.54
11. Pedone, A; Malavasi, G; Menziani, MC; et al.
FFSiOH: a new force field for silica polymorphs and their hydroxylated surfaces based on periodic B3LYP calculations
CHEMISTRY OF MATERIALS **20**, 2522-2531 (2008). IF 6.38
12. Pedone, A; Malavasi, G; Menziani, MC; et al.
A new self-consistent empirical interatomic potential model for oxides, silicates, and silica-based glasses
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B **110**, 11780-11795 (2006). IF 3.63
13. Pelloni, S; Faglioni, F; Zanasi, R; Lazzeretti, P
Topology of magnetic-field-induced current-density field in diatropic monocyclic molecules
PHYSICAL REVIEW A **74**, 012506 (2006). IF 2.861
14. Prezzi, D; Varsano, D; Ruini, A; et al.
Optical properties of graphene nanoribbons: The role of many-body effects
PHYSICAL REVIEW B **77**, 041404 (2008). IF 3.774
15. Righi, MC and Ferrario, M
Pressure induced friction collapse of rare gas boundary layers sliding over metal surfaces
PHYSICAL REVIEW LETTERS **99**, 176101 (2007). IF 7.328
16. Zanella, R; Boccacci, P; Zanni, L; Bertero, M
Efficient gradient projection methods for edge-preserving removal of Poisson noise
INVERSE PROBLEMS **25**, 045010 (2009). IF 2.124
17. Zanni, L; Serafini, T; Zanghirati, G
Parallel software for training large scale support vector machines on multiprocessor systems
JOURNAL OF MACHINE LEARNING RESEARCH **7**, 1467-1492 (2006). IF 2.949
18. M. Reguzzoni, M. Ferrario; S. Zapperi, M.C. Righi,
Onset of frictional slip by domain nucleation in adsorbed monolayers
PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA **107**, 1311 (2010)
19. Contucci, P; Giardinà, C; Giberti, C; Vernia, C
Overlap equivalence in the Edwards-Anderson model
PHYSICAL REVIEW LETTERS **96** (21), 217204 (2006) IF 7.621, CIT 10
20. M. Rontani, C. Cavazzoni, D. Bellucci, G. Goldoni,

Full configuration interaction approach to the few-electron problem in artificial atoms

JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (2006) CIT 79