

## INFORMAZIONI PERSONALI



## Giuseppe Mattioli

📍 Viale delle Milizie 3, Roma, Italia  
☎ 0690672342 📠 3737305625  
✉ giuseppe.mattioli@ism.cnr.it  
🌐 <http://www.ism.cnr.it/it/staff/giuseppe-mattioli/>

Sesso Maschio | Data di nascita 18/03/1974 | Nazionalità Italiana

## POSIZIONE RICOPERTA

Ricercatore III livello CNR

## TITOLO DI STUDIO

Laurea in Chimica (V.O.), Dottorato di Ricerca in Scienza dei Materiali.

## DICHIARAZIONI PERSONALI

**La mia attività scientifica si è articolata principalmente all'interno di quello che precedentemente era il Dipartimento Materiali e Dispositivi ed attualmente è il Dipartimento di Scienze Fisiche e Tecnologie della Materia del CNR.** Nonostante il DSFTM rappresenti indubbiamente una delle punte di diamante del CNR, sia per la capacità di produrre risultati scientifici di altissimo livello che per quella di finanziarsi partecipando a bandi per progetti di ricerca nazionali ed internazionali, non manca più di una criticità. Credo che la comunità scientifica debba quindi urgentemente essere coinvolta in una discussione ampia su tre aspetti fondamentali della vita del dipartimento:

- 1) Il DSFTM, inteso come nucleo direttivo ed amministrativo, deve avere un ruolo più incisivo nell'azione di coordinamento tra gli Istituti afferenti, razionalizzando le azioni per la raccolta di finanziamenti e garantendo una crescita più uniforme del patrimonio di competenze ed infrastrutture. **Questo obiettivo si può perseguire solo rigettando l'idea che solo l'eccellenza debba essere premiata e finanziata, un concetto sbagliato che finisce per distribuire i finanziamenti sempre alle stesse persone ed in base a logiche e meccanismi opachi, e sostituendola con un nuovo paradigma, basato sull'idea che l'eccellenza debba essere pianificata e costruita per mezzo dei finanziamenti nel maggior numero di luoghi che l'istituzione può sostenere.**
- 2) Il reclutamento del personale deve essere maggiormente coordinato, al fine di renderlo meno dipendente dalle fluttuazioni nei finanziamenti esterni, **più attento alla dignità dei lavoratori con contratti a termine**, e più trasparente nella gestione dei percorsi di immissione in ruolo nelle diverse aree strategiche.

3) L'uso dei fondi assegnati dal MIUR per attività progettuali deve essere improntato ai più stringenti criteri di trasparenza ed efficienza, con la fruizione più larga possibile della strumentazione scientifica da parte di ricercatori e tecnologi e assoggettato ad una valutazione più rigorosa dei benefici prodotti dai fondi impiegati.

Ho sviluppato un'esperienza consolidata nel design e nello studio di proprietà chimiche e fisiche di materiali inorganici, organici e ibridi organico-inorganico mediante tecniche avanzate di *modeling* basate su metodi teorici *ab initio*. Possiedo ottime capacità di interazione con il lavoro sperimentale di sintesi e caratterizzazione avanzata degli stessi materiali. All'interno dell'Istituto di Struttura della Materia, nel quale lavoro attualmente come Ricercatore, sono da tempo stato stimolato a lavorare in completa autonomia, in particolare per quanto riguarda l'individuazione degli obiettivi di ricerca, la scrittura di progetti di ricerca e lo sviluppo originale ed innovativo di linee di ricerca. Tale autonomia è dimostrata, tra le altre cose, dall'**elevato numero di pubblicazioni su riviste internazionali firmate come "first" e/o "corresponding" author** (vedi lista pubblicazioni). Sono stato responsabile di un'unità operativa dell'Istituto di Struttura della Materia all'interno del progetto "Elettronica Organica per Strumentazione di ricerca innovativa" (EOS, finanziamento premiale 7% su FFO bando 2012, erogato dal MIUR). Sono inoltre responsabile di un'unità operativa mista ISM-CNR/IMM-CNR all'interno del progetto "Boosting sustainability in plastic electronics: the key role of functional surfactants as reaction medium and dispersing agents" (BOOSTER, bando PRIN 2017).

## ESPERIENZA PROFESSIONALE

---

Luglio 2013  
oggi Ricercatore III livello (a TI dal 30 Novembre 2018)  
Istituto di Struttura della Materia del CNR, Sede Secondaria di Montelibretti, Area della Ricerca di Roma 1

■ La mia attività di ricerca recente è caratterizzata da un elevato grado di autonomia nell'intraprendere nuovi progetti di ricerca e nell'avviare collaborazioni di ricerca nazionali ed internazionali. Tale autonomia è comprovata tra le altre cose dalla partecipazione come *principal investigator* o responsabile di unità operativa per conto dell'Istituto di Struttura della Materia a bandi e progetti di ricerca. L'attività è stata principalmente dedicata allo studio con metodi *ab initio* delle proprietà chimiche e fisiche di interfacce e materiali inorganici e ibridi organico/inorganico, sia nell'ambito della realizzazione di dispositivi fotovoltaici/fotosintetici (partecipazione a progetto MEF e progetto premiale MIUR "Energia da Fonti Rinnovabili" (EFOR)), sia nell'ambito della realizzazione di dispositivi optoelettronici a semiconduttore organico (partecipazione come responsabile di unità CNR al progetto premiale MIUR "Elettronica Organica per Strumentazione

innovativa di ricerca” (EOS) ed al progetto PRIN 2017 “Boosting sustainability in plastic electronics: the key role of functional surfactants as reaction medium and dispersing agents” (BOOSTER), che nell’ambito della valorizzazione dei materiali ibridi di scarto composti da fasi inorganiche disperse in polimeri per loro riuso nell’industria automobilistica (partecipazione al progetto “RICIRCOLA”). Tutte le attività di ricerca di questi ultimi anni hanno prodotto pubblicazioni su riviste internazionali, **consolidando la mia reputazione internazionale nel campo del modelling con metodi ab initio delle proprietà chimiche e fisiche di materiali inorganici ed ibridi organico-inorganico usati in molteplici ambiti di applicazione tecnologica.**

Dicembre 2010 Assegnista di Ricerca Senior

Giugno 2013 Gruppo *Materials Modeling Lab* sotto la supervisione del Dr. Aldo Amore Bonapasta.

Istituto di Struttura della Materia del CNR, Sede Secondaria di Montelibretti, Area della Ricerca di Roma 1

■ La mia attività di ricerca principale ha riguardato lo studio delle proprietà chimiche e fisiche di interfacce e materiali ibridi organico-inorganico mediante l'uso di metodi teorici *ab initio*, nel quadro di progetti di ricerca mirati al *modeling* ed alla realizzazione di celle solari fotovoltaiche ad elettrodo fotosensitizzato (partecipazione a progetto MEF e progetto premiale MIUR “Energia da Fonti Rinnovabili” (EFOR)) e ad eterogiunzione (progetto IIT-SEED POLymer based hYbrid nanomaterials for PHotovoltaics: improving Efficiency by theoretical Modeling (POLYPHEMO)). Tra i risultati raggiunti spicca il design teorico di un materiale attivo innovativo per dispositivi fotovoltaici ad eterogiunzione, la cui utilità è stata comprovata dalla realizzazione del dispositivo stesso nell'ambito di una collaborazione internazionale con Jorg Ackermann ed i suoi collaboratori del CINaM-CNRS Marseille.

Giugno 2010 Assegnista di Ricerca

Novembre 2010 Laboratorio *Sardinian Laboratory for Computational Materials Science (SLACS)* sotto la supervisione del Dr. Alessandro Mattoni.

Istituto Officina dei Materiali del CNR, sede secondaria di Cagliari.

■ La mia attività di ricerca principale ha riguardato il design e lo studio delle proprietà chimiche e fisiche di interfacce e materiali ibridi organico-inorganico con metodi teorici *ab initio*, nel quadro di un progetto di ricerca mirato alla modellizzazione multiscala di celle solari fotovoltaiche ad eterogiunzione (progetto IIT-SEED POLymer based hYbrid nanomaterials for PHotovoltaics: improving Efficiency by theoretical Modeling (POLYPHEMO)). Sono state qui gettate le basi modellistiche, con particolare riferimento allo sviluppo di un metodo teorico multiscala avanzato per lo studio di materiali ibridi organico-inorganico a molti componenti, fondamentali per il raggiungimento degli obiettivi di ricerca descritti nel periodo di lavoro successivo.

Gennaio 2010 Assegnista di Ricerca  
Maggio 2010 Gruppo *Computational Biophysics Biochemistry and Chemistry* (CBBC) sotto la supervisione del Prof. Leonardo Guidoni  
Dipartimento di Fisica, "Sapienza" Università di Roma

■ La mia attività di ricerca è stata incentrata sullo studio delle proprietà fisiche e chimiche di catalizzatori inorganici per la fotosintesi artificiale mediante metodi teorici *ab initio*, nell'ambito del progetto FP7 "MultiscaleChemBio" finanziato dallo European Research Council. L'attività di *modelling* è stata svolta in stretta collaborazione con l'attività sperimentale (sintesi chimica e caratterizzazione mediante misure elettrochimiche e di assorbimento di raggi X) del prof. Holger Dau (Freie Universitat Berlin) e dei suoi collaboratori. La conoscenza acquisita in questo periodo e le basi di collaborazione (italiana ed internazionale) stabilite durante la partecipazione al progetto garantiscono tuttora un output di elevata qualità in termini di pubblicazioni su riviste internazionali, ed una buona visibilità internazionale del mio lavoro in un ambito scientifico di grande attualità come la fotosintesi artificiale. Un progetto SIR-MIUR (2014) su tale tematica, presentato da me come *principal investigator*, ha superato la prima fase di valutazione ed ha avuto nella seconda fase una valutazione di 29/30, strettamente a ridosso dei progetti che hanno ricevuto finanziamenti.

Novembre 2008 Assegnista di Ricerca  
Dicembre 2009 Gruppo *Materials Modeling Lab* sotto la supervisione del Dr. Aldo Amore Bonapasta.

Istituto di Struttura della Materia del CNR, Sede Secondaria di Montelibretti, Area della Ricerca di Roma 1

■ La mia attività di ricerca è stata focalizzata sull'approfondimento dello studio delle proprietà chimiche della superficie di ossidi metallici e delle proprietà opto-elettroniche di sistemi ibridi organico-inorganico con metodi teorici *ab initio*, attività iniziate durante lo svolgimento delle tesi di laurea e di dottorato. Ho cominciato durante questo periodo di attività a pubblicare lavori come *corresponding author* che sono stati accolti con favore dalla comunità scientifica di riferimento, gettando le basi per la costruzione dell'autonomia professionale chiaramente riconoscibile nell'attività di ricerca più recente.

## ISTRUZIONE E FORMAZIONE

---

19 Dicembre 2008 Dottorato di Ricerca in Scienza dei Materiali

Livello  
QE-Q 8

"Sapienza" Università di Roma, Corso di Dottorato interdipartimentale (Chimica e Fisica) in Scienza dei Materiali.

- Tesi: “Theoretical Studies of Phthalocyanine-Inorganic Semiconductor Systems for Designing Novel Hybrid Heterostructures” sotto la supervisione del Prof. Ruggero Caminiti.
- L'attività come studente di dottorato è stata finanziata da una borsa di studio conferita in qualità di vincitore del concorso di dottorato. L'attività di ricerca è consistita nello studio delle proprietà strutturali, elettroniche ed ottiche delle giunzioni tra semiconduttori inorganici (di classe III-V, o ossidi metallici come TiO<sub>2</sub>) ed una particolare classe di semiconduttori organici, le metallo-ftalocianine, al fine di stabilire se la giunzione ibrida possedesse i requisiti per funzionare come sensore o *switch* opto-elettronico. Lo studio è stato condotto mediante l'uso di metodi teorici *ab initio*. Già a partire dal 2006 la produzione scientifica collegata all'attività di ricerca si contraddistingue per l'elevato numero di lavori firmati come *first* e, a partire dal 2008, come *corresponding author*.

20 Aprile 2005 Laurea in Chimica (V. O.)

Livello  
QE Q 7

Dipartimento di Chimica, “Sapienza” Università di Roma.

- Corso di studi quinquennale con elementi caratterizzanti nell'ambito della Chimica-Fisica Inorganica/Teorica.
- Tesi: “Studio teorico *ab initio* delle proprietà fotocatalitiche della superficie (101) del biossido di titanio (anatasio)
- Votazione finale 110/110 e lode

## COMPETENZE PERSONALI

Lingua madre Italiano

Altre lingue	COMPRESIONE		PARLATO		PRODUZIONE SCRITTA
	Ascolto	Lettura	Interazione	Produzion e orale	
Inglese	B2	C1	B2	B2	C1
Advanced level certificato da British Council, Roma (2008)					

## Competenze professionali

Nel corso della mia formazione come Dottore di Ricerca e attività professionale come Assegnista di Ricerca e Ricercatore ho maturato un'esperienza specifica in diversi campi di applicazione delle simulazioni *ab initio*, ed ho sviluppato la capacità di individuare i metodi più appropriati per il *modeling* e per lo studio teorico delle proprietà chimiche e fisiche di classi diverse di materiali innovativi, assieme alla capacità di mettere in relazione risultati teorici e sperimentali ottenuti mediante caratterizzazioni avanzate di tali materiali. La partecipazione a diverse collaborazioni nazionali ed internazionali ed a progetti finanziati mi ha consentito di sviluppare in particolare competenze specifiche su:

- Proprietà chimiche (catalisi, fotocatalisi, reattività, interfaccia

solido/liquido e solido/gas) e fisiche (struttura delle bande elettroniche, proprietà dei difetti e droganti, proprietà strutturali di sistemi cristallini, amorfi e nanostrutturati) di ossidi metallici quali TiO<sub>2</sub>, ZnO, vari ossidi amorfi e cristallini di Mn e Co. Lo studio di questi materiali mediante metodi *ab initio*, principalmente basati sulla teoria del funzionale densità (DFT), ha incluso in particolare lo sviluppo di strategie originali per il trattamento di elettroni fortemente correlati in sistemi di grandi dimensioni, basate sulle metodologie “self-consistent” per l'uso dell'hamiltoniana di Hubbard (DFT+U).

■ Proprietà strutturali, elettroniche ed ottiche di materiali ibridi complessi, formati dall'interazione di molecole e/o polimeri con metalli, semiconduttori ed ossidi metallici. La capacità di design e simulazione di sistemi di grandi dimensioni (>1000 atomi, >10000 elettroni) con metodi *ab initio* (principalmente DFT e time-dependent DFT) basati su pseudopotenziali ed onde piane come funzioni di base costituisce una specificità poco diffusa altrove della mia attività di ricerca. Tale specificità mi ha permesso di studiare con successo le proprietà di elettrodi e layer fotoattivi per celle solari fotovoltaiche, e giunzioni tra metallo o semiconduttore inorganico e semiconduttore organico per dispositivi optoelettronici innovativi.

■ Proprietà fisiche di semiconduttori convenzionali e a largo band gap (GaAs, GaAsN, GaN, InN, InAs, InGaN), con particolare attenzione alle proprietà termodinamiche ed optoelettroniche di difetti, intrinseci o appositamente indotti in tali materiali, droganti e complessi idrogenati. Anche in questo caso lo studio con metodi *ab initio* di tali materiali ha incluso in particolare lo sviluppo di strategie originali per il trattamento di elettroni fortemente correlati basate sulle metodologie *self-consistent* per l'uso dell'hamiltoniana di Hubbard (DFT+U).

■ Proprietà chimico-fisiche di molecole organiche e metallo-organiche, con particolare applicazione allo studio di metallo-ftalocianine e metallo-porfirine utilizzate nei dispositivi elettronici organici, e di piccole molecole aromatiche, studiate in stretta sinergia con attività sperimentali centrate sulla spettroscopia di fotoemissione con luce di sincrotrone in fase gassosa, condotte presso la beamline “Gas Phase” di ELETTRA – Trieste.

**Le attività descritte individuano chiaramente il valore aggiunto della mia professionalità, costruita come un solido ponte tra la Chimica e la Fisica dei materiali innovativi ed avanzati**, capace di elaborare il design di materiali, di usare il potere predittivo delle simulazioni *ab initio* per valutare le proprietà di materiali complessi, di interagire strettamente con gli esperimenti di caratterizzazione avanzata dei materiali stessi per confermarne ed interpretarne i risultati.

Competenza digitale

#### AUTOVALUTAZIONE

Elaborazione delle informazioni	Comunicazione	Creazione di Contenuti	Sicurezza	Risoluzione di problemi
Utente	Utente	Utente	Utente	Utente

avanzato	avanzato	avanzato	intermedio	avanzato
----------	----------	----------	------------	----------

Buona padronanza di sistemi UNIX/LINUX

- Compilazione e gestione di software per il calcolo scientifico in ambiente UNIX/LINUX.
- Ottima conoscenza delle suite di programmi Quantum ESPRESSO, ORCA, buona conoscenza delle suite di programmi CPMD, CP2K.
- Scrittura di programmi Fortran (77/95) a moderato grado di complessità.
- Padronanza di un'ampia tipologia di software per la redazione e preparazione di presentazioni e testi scientifici (latex, beamer, suites "office-like" in ambiente LINUX/UNIX) e per il trattamento integrato di dati/immagini (gnuplot, xfig, gimp, blender).
- Attività di ricerca sostenuta continuativamente dal conferimento di *grant* assegnati su base competitiva per l'uso di risorse di calcolo su sistemi ad alte prestazioni nei maggiori centri di calcolo italiani ed in alcuni casi europei.

## ULTERIORI INFORMAZIONI

---

**Concorsi** *Bando di selezione CNR n. 364.96 del 29/12/2009, codice di riferimento RM87/3.*

Conseguimento di idoneità a ricoprire la posizione di ricercatore III livello a tempo indeterminato nell'area disciplinare B1 "Fisica".

*Bando di selezione CNR n. 364.92 del 29/12/2009, codice di riferimento MI79/5.*

Conseguimento di idoneità a ricoprire la posizione di ricercatore III livello a tempo indeterminato nell'area disciplinare C1 "Chimica".

*Bando di selezione CNR n. 367.19 del 25/03/2016, ISTM-CNR*

Conseguimento di idoneità a ricoprire la posizione di ricercatore III livello.

*Bando di selezione CNR n. 368.17 del 1/7/2016, AREA STRATEGICA MATERIALI INNOVATIVI, TECNICHE AVANZATE DI CARATTERIZZAZIONE E MODELLING - DSFTM*

Conseguimento di idoneità a ricoprire la posizione di ricercatore III livello.

## Progetti di Ricerca

## Partecipazione a progetti finanziati

**Progetto "MultiscaleChemBio"**, Starting Grant n. 240624 dello European Research Council nell'ambito del FP7.

Responsabile: Prof. Leonardo Guidoni, Università de L'Aquila

Importo totale finanziamento: euro 1.200.000

Periodo di attività dal 1/10/2009 al 30/9/2015

Finalità del progetto: Sviluppo di un metodo teorico multiscala per lo studio di sistemi biologici fotosintetici e loro analoghi artificiali

Risultati ottenuti: Nell'ambito dello studio di sistemi fotosintetici artificiali il progetto ha prodotto nel corso degli anni pubblicazioni di forte rilievo internazionale sullo studio teorico della struttura e reattività di ossidi metallici amorfi che catalizzano la reazione di ossidazione dell'acqua.

La mia partecipazione al progetto è stata finalizzata all'apertura e gestione autonoma di una linea di ricerca riguardante lo studio con metodi *ab initio* delle proprietà fisiche e chimiche di ossidi/idrossidi metallici biomimetici dotati di forte attività catalitica nei processi fotosintetici artificiali, in particolar modo per l'ossidazione di acqua e produzione di idrogeno.

### **Progetto “Energia da Fonti Rinnovabili”**

**Fase I:** Progetti per l'innovazione e lo sviluppo nel mezzogiorno finanziati dal Ministero Economia e Finanza (MEF) e coordinati dal CNR. Delibera 73/2011, data 29/03/2011.

Responsabile: Prof. Giuseppe Gigli, NANOTEC-CNR

Importo totale finanziamento: euro 4.902.800

Finanziamento unità operativa di appartenenza: euro 160.000

Periodo di attività dal 7/2011 al 7/2014

**Fase II** Progetto finanziamento premiale 7% su FFO bando 2011, erogato dal MIUR, protocollo non disponibile, vedi titolo precedente di cui il presente progetto costituisce continuazione.

Responsabile: Prof. Giuseppe Gigli, NANOTEC-CNR

Importo totale finanziamento: euro 16.250.000

Finanziamento unità operativa di appartenenza: euro 110.000

Periodo di attività dal 7/2014 al 7/2015

Finalità del progetto: Sviluppo di nuovi materiali fotoattivi e dispositivi fotovoltaici e fotosintetici per la produzione di energia da fonti rinnovabili.

Risultati ottenuti: L'unità operativa ha ottenuto risultati documentati da diverse pubblicazioni nell'ambito della sintesi di nuovi materiali, in particolare assorbitori di radiazione solare supportati su biossido di titanio, e della caratterizzazione, sperimentale e mediante metodi teorici *ab initio*, dei materiali prodotti nell'ambito del loro funzionamento in dispositivi fotovoltaici.

La mia partecipazione ad un'unità operativa teorico-sperimentale (responsabile Dr. Giovanna Pennesi, ISM-CNR) è documentata da pubblicazioni nell'ambito del progetto focalizzate sullo studio di materiali ibridi innovativi da utilizzare come layer fotoattivi in celle solari fotovoltaiche. In dettaglio, studi da principi primi di materiali fotoattivi (molecole, anche supportate su elettrodo a semiconduttore) e delle loro proprietà nell'ambito del funzionamento dei dispositivi fotovoltaici.

### **Progetto “POLYmer based hYbrid nanomaterials for**

***PHotovoltaics: improving Efficiency by theoretical Modeling***  
**(POLYPHEMO)**, Bando competitivo SEED 2009 dell'Istituto Italiano di Tecnologia (IIT), Protocollo INFN-CNR 19376 del 28/12/2009.

Responsabile: Alessandro Mattoni, IOM-CNR.

Importo totale finanziamento: euro 390.000

Finanziamento unità operativa di appartenenza: 98.000

Periodo di attività dal 5/2010 al 5/2013

Finalità del progetto: Sviluppo di un framework teorico multiscala per lo studio di materiali complessi formati da polimeri, molecole e semiconduttori inorganici e utilizzabili come strati fotoattivi in celle solari "bulk-heterojunction". Coordinamento delle attività teoriche con partner di ricerca per la realizzazione di dispositivi solari prototipali.

Risultati ottenuti: Il progetto ha prodotto l'elaborazione di un protocollo teorico multiscala (*ab initio*, (meta)dinamica molecolare classica, metodo Montecarlo) per lo studio di materiali complessi ibridi polimero/molecola/semiconduttore inorganico. L'applicazione del metodo ha portato ad una serie di pubblicazioni internazionali, inclusa una molto prestigiosa su *Advanced Energy Materials*, in cui idee sviluppate a partire dal design teorico hanno trovato conferma nella realizzazione di dispositivi fotovoltaici ibridi.

La mia partecipazione ad una unità operativa del progetto (responsabile Dr. Aldo Amore Bonapasta, ISN-CNR) si è focalizzata sul design di interfacce multicomponente ossido metallico/molecola/polimero e sullo studio teorico *ab initio* delle loro proprietà elettroniche e ottiche, con particolare riferimento ai meccanismi di funzionamento/miglioramento dei materiali fotoattivi in celle solari ibride/polimeriche.

***Progetto "Elettronica Organica per Strumentazione di ricerca innovativa" (EOS)***, Progetto interente INFN/CNR, finanziamento premiale 7% su FFO bando 2012, erogato dal MIUR, Prot. n. 0022097 MIUR del 31/10/2013 e Prot. ISM-CNR n. 0001934/16

Responsabile: Alberto Aloisio (INFN), Antonio Cassinese (SPIN-CNR).

Responsabile unità ISM-CNR: Giuseppe Mattioli.

Importo totale finanziamento: euro 1.600.000

Finanziamento unità operativa di appartenenza: 40.000

Periodo di attività dal 1/2015 al 12/2016

Finalità del progetto: Sviluppo di dispositivi elettronici organici (e.g. OFET, CMOS, Inverter) basati su nuovi materiali da parte delle unità CNR. Le unità INFN utilizzano i dispositivi prodotti dal CNR per l'assemblaggio di circuiti integrati per usi diversi (switch ultraveloci, rilevatori di radiazione, ...).

Risultati ottenuti: Il progetto ha prodotto dispositivi optoelettronici basati sui materiali originali sviluppati dalle unità CNR. Tali dispositivi sono stati utilizzati per produrre circuiti integrati e prototipi di nuovi rilevatori di radiazione da parte delle unità INFN.

La mia partecipazione come responsabile di unità operativa ISM-CNR si è concentrata sullo studio con metodi teorici *ab initio* delle proprietà di nuovi semiconduttori organici e della loro interazione con elettrodi metallici, in stretta collaborazione con le attività di sintesi e caratterizzazione di tali materiali e di realizzazione di dispositivi svolta da altre unità operative del progetto.

**Progetto “RI-CIRCOLA - La fabbrica verso una economia circolare: dal recupero della plastica all'end of life dei veicoli”**, Progetto finanziato dal Ministero dello Sviluppo Economico - Bando MISE S&C - DM 1 giugno 2016, "Horizon 2020" PON 2014/2020.

Importo totale finanziamento: euro 3974000.

Quota CNR: euro 1217000 (finanziamento effettivo euro 730000).

Responsabile CNR: Antonio Santagata, ISM-CNR.

Periodo di attività dal Febbraio 2017 al dicembre 2018.

Finalità del progetto: Il progetto aveva come l'obiettivo, lo studio, lo sviluppo e l'utilizzo di materiali avanzati ottenuti dal recupero di materiali di riciclo (scarti industriali e veicoli di fine vita). La realizzazione del progetto ha permesso la razionalizzazione dell'uso delle risorse ed il miglioramento dell'efficienza energetica e della sostenibilità ambientale, del ciclo produttivo di uno stabilimento della società FCA Italy (stabilimento di Melfi), con particolare riferimento ai materiali dei componenti non metallici dell'autoveicolo.

La mia partecipazione ha contribuito con simulazioni atomistiche allo studio dell'interazione di materie plastiche (principalmente polipropilene) con diversi tipi di silicati ed alluminosilicati inorganici, al fine di trovare strategie per la valorizzazione a basso costo degli scarti di lavorazione in fabbrica e dei materiali recuperati dagli autoveicoli a fine-ciclo.

**Progetto “Boosting sustainability in plastic electronics: the key role of functional surfactants as reaction medium and dispersing agents (BOOSTER)”**, Progetto finanziato dal Ministero per l'Istruzione, l'Università e la Ricerca, bando PRIN 2017 – Panel PE5, Decreto Direttoriale 316/2019.

Responsabile: Prof. Luca Beverina (UNIMIB)

Importo totale finanziamento: euro 826000

Quota CNR: euro 220000

Responsabile CNR: Giuseppe Mattioli, ISM-CNR.

Periodo di attività: il progetto deve ancora iniziare.

Finalità del progetto: il progetto si propone il duplice obiettivo di rivoluzionare il processo produttivo dei materiali organici per applicazioni optoelettroniche, esplorando la possibilità di impiego di tecniche a bassissimo impatto ambientale, ed allo stesso tempo di innovare il prodotto stesso, per migliorare efficienza e stabilità delle tre grandi famiglie di dispositivi elettronici organici: OFET, OLED e OPV.

L'unità CNR da me diretta, a cui contribuiscono ISM-CNR ed

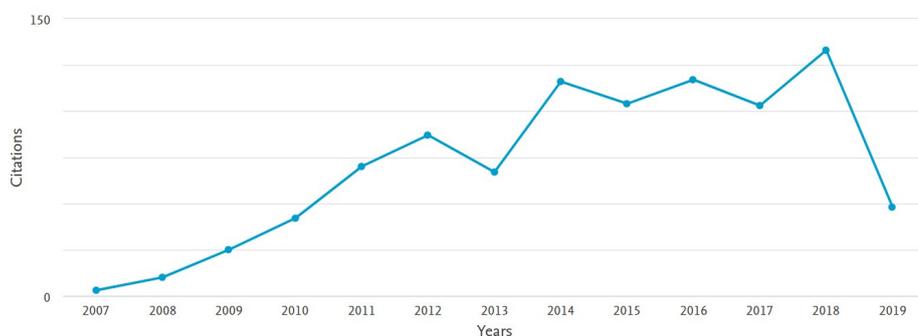
IMM-CNR, ha i compiti di assistere la sintesi dei materiali mediante l'uso di simulazioni ab initio, di collaborare alla sintesi di molecole, in particolare metallo-organiche, e di assemblare e caratterizzare dispositivi di tipo OFET.

## Publicazioni

### Metrica di tutte le pubblicazioni su rivista internazionale fonte: Web Of Science e SCOPUS



## WOS



## SCOPUS

**h-index: 16 (WOS); 17 (SCOPUS).**

**Researcher ID: F-6308-2012**

**SCOPUS ID: 35305343700**

**ORCID ID: 0000-0001-6331-198X**

### Publicazioni su rivista internazionale.

**(\*)=corresponding author**

**[P1] Mattioli, G.;** Filippone, F.; Amore Bonapasta, A.

*J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 13772.

DOI: 10.1021/ja062145x

*Reaction Intermediates in the Photoreduction of Oxygen Molecules at the (101) TiO<sub>2</sub> (Anatase) Surface.*

WOS citations: 59

SCOPUS citations: 58

IF 14.357 (Journal Citation Reports 2017)

**[P2] Amore Bonapasta, A.;** Filippone, F.; **Mattioli, G.**

*AIP Conf. Proc.* **2007**, *893*, 233.

DOI: 10.1063/1.2729854

*Multiple hydrogen complexes in dilute nitride alloys.*

WOS citations: n.d

SCOPUS citations: n.d.

**[P3]** Filippone, F.; **Mattioli, G.**; Amore Bonapasta, A.  
*Catal. Today* **2007**, *129*, 169. DOI: 10.1016/j.cattod.2007.06.064  
*Reaction intermediates and pathways in the photoreduction of oxygen molecules at the (101) TiO<sub>2</sub> (anatase) surface.*  
WOS citations: 16 SCOPUS citations: 15  
IF 4.667 (Journal Citation Reports 2017)

**[P4]** Amore Bonapasta, A.; Filippone, F.; **Mattioli, G.**  
*Phys. Rev. Lett.* **2007**, *98*, 206403.  
DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.206403  
*H-Induced Dangling Bonds in H-Isoelectronic-Impurity Complexes Formed in GaAs<sub>1-y</sub>N<sub>y</sub> Alloys.*  
WOS citations: 19 SCOPUS citations: 21  
IF 8.839 (Journal Citation Reports 2017)

**[P5]** **Mattioli, G.\***; Filippone, F.; Alippi, P.; Amore Bonapasta, A.  
*Phys. Rev. B* **2008**, *78*, 241201(R).  
DOI: 10.1103/PhysRevB.78.241201  
*Ab initio study of the electronic states induced by oxygen vacancies in rutile and anatase TiO<sub>2</sub>.*  
WOS citations: 165 SCOPUS citations: 174  
IF 3.813 (Journal Citation Reports 2017)

**[P6]** **Mattioli, G.**; Filippone, F.; Giannozzi, P.; Caminiti, R.; Amore Bonapasta, A.  
*Phys. Rev. Lett.* **2008**, *101*, 126805.  
DOI: 10.1103/PhysRevLett.101.126805  
*Theoretical design of coupled organic-inorganic systems.*  
WOS citations: 13 SCOPUS citations: 13  
IF 8.839 (Journal Citation Reports 2017)

**[P7]** **Mattioli, G.\***; Filippone, F.; Caminiti, R.; Amore Bonapasta, A.  
*J. Phys. Chem. C* **2008**, *112*, 13579.  
DOI: 10.1021/jp8031176  
*Short Hydrogen Bonds at the Water/TiO<sub>2</sub> (Anatase) Interface.*  
WOS citations: 40 SCOPUS citations: 41  
IF 4.484 (Journal Citation Reports 2017)

**[P8]** Filippone, F.; **Mattioli, G.**; Amore Bonapasta, A.  
*J. Phys.: Condens. Matter* **2008**, *20*, 125215.  
DOI: 10.1088/0953-8984/20/12/125215  
*Hydrogen and interstitial Mn complexes in Mn<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As dilute magnetic semiconductor.*  
WOS citations: 1 SCOPUS citations: 1  
IF 2.617 (Journal Citation Reports 2017)

**[P9]** Filippone F., **Mattioli G.**, Alippi P., Amore Bonapasta A.

*Phys. Rev. B* **2009**, *80*, 245203.  
DOI: 10.1103/PhysRevB.80.245203  
*Properties of hydrogen and hydrogen-vacancy complexes in the rutile phase of titanium dioxide.*  
WOS citations: 38 SCOPUS citations: 43  
IF 3.813 (Journal Citation Reports 2017)

**[P10] Mattioli, G.\***; Filippone, F.; Giannozzi, P.; Caminiti, R.; Amore Bonapasta, A.  
*Chem. Mater.* **2009**, *21*, 4555.  
DOI: 10.1021/cm9014755  
*Design of Phthalocyanine-Semiconductor Hybrid Interfaces: A Theoretical DFT Investigation.*  
WOS citations: 24 SCOPUS citations: 25  
IF 9.890 (Journal Citation Reports 2017)

**[P11]** Amore Bonapasta A., Filippone F., **Mattioli G.**, Alippi P.  
*Catal. Today* **2009**, *144*, 177.  
DOI: 10.1016/j.cattod.2009.01.047  
*Oxygen vacancies and OH species in rutile and anatase TiO<sub>2</sub> polymorphs.*  
WOS citations: 44 SCOPUS citations: 45  
IF 4.667 (Journal Citation Reports 2017)

**[P12]** Bolognesi P., **Mattioli G.**, O'Keeffe P., Feyer V., Plekan O., Ovcharenko Y., Prince K. C., Coreno M., Amore Bonapasta A., Avaldi L.  
*J. Phys. Chem. A* **2009**, *113*, 13593.  
DOI: 10.1021/jp908512v  
*Investigation of Halogenated Pyrimidines by X-ray Photoemission Spectroscopy and Theoretical DFT Methods.*  
WOS citations: 21 SCOPUS citations: 25  
IF 2.836 (Journal Citation Reports 2017)

**[P13]** Bolognesi P., O'Keeffe P., Feyer V., Plekan O., Prince K. C., Coreno M., **Mattioli G.**, Amore Bonapasta A., Zhang, W., Carravetta, V., Ovcharenko Y., Avaldi L.  
*J. Phys.: Conf. Series* **2010**, *212*, 012002.  
DOI: 10.1088/1742-6596/212/1/012002  
*Inner shell excitation, ionization and fragmentation of pyrimidine.*  
WOS citations: n.d. SCOPUS citations: 12

**[P14] Mattioli, G.**; Filippone, F.; Amore Bonapasta, A.  
*J. Phys. Chem. Lett.* **2010**, *1*, 2757.  
DOI: 10.1021/jz100852a  
*Controlling the Magnetic Properties of a Single Phthalocyanine Molecule through its Strong Coupling with the GaAs Surface.*  
WOS citations: 12 SCOPUS citations: 12  
IF 8.709 (Journal Citation Reports 2017)

**[P15] Mattioli, G.\***; Alippi, P.; Filippone, F.; Caminiti, R.; Amore Bonapasta, A.

*J. Phys. Chem. C* **2010**, *114*, 21694.  
DOI: 10.1021/jp1041316  
*Deep versus Shallow Behavior of Intrinsic Defects in Rutile and Anatase TiO<sub>2</sub> Polymorphs.*  
WOS citations: 89 SCOPUS citations: 91  
IF 4.484 (Journal Citation Reports 2017)

**[P16]** Filippone, F.; **Mattioli, G.**; Alippi, P.; Amore Bonapasta, A.  
*Phys. Rev. Lett.* **2011**, *107*, 196401.  
DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.196401  
*Clusters and Magnetic Anchoring Points in (Ga,Fe)N Condensed Magnetic Semiconductors.*  
WOS citations: 19 SCOPUS citations: 20  
IF 8.839 (Journal Citation Reports 2017)

**[P17]** Zanotti, G.; Angelini, N.; Paoletti, A.M.; Pennesi, G.; Rossi, G.; Amore Bonapasta, A.; **Mattioli, G.**; Di Carlo, A.; Brown, T.M.; Lembo, A.; Reale, A.  
*Dalton Trans.* **2011**, *40*, 38.  
DOI: 10.1039/c0dt01292k  
*Synthesis of a novel unsymmetrical Zn(II) phthalocyanine bearing a phenyl ethynyl moiety as sensitizer for dye-sensitized solar cells.*  
WOS citations: 17 SCOPUS citations: 14  
IF 4.099 (Journal Citation Reports 2017)

**[P18]** Zanotti G., **Mattioli G.**, Notarantonio S., Paoletti A.M., Rossi G., Amore Bonapasta A., Pennesi G.  
*Macroheterocycles* **2011**, *4*, 161.  
*Synthesis and Properties of a Heteroleptic  $\mu$ -Nitrido Tetrapyrrolic Complex.*  
WOS citations: n.d. SCOPUS citations: 4  
IF 1.086 (Journal Citation Reports 2017)

**[P19]** **Mattioli, G.\***; Risch, M.; Amore Bonapasta, A.; Dau, H.; Guidoni, L.  
*Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, *13*, 15437.  
DOI: 10.1039/c1cp21776c  
*Protonation states in a cobalt-oxide catalyst for water oxidation: fine comparison of ab initio molecular dynamics and X-ray absorption spectroscopy results.*  
WOS citations: 27 SCOPUS citations: 28  
IF 3.906 (Journal Citation Reports 2017)

**[P20]** Alippi, P.; Filippone, F.; **Mattioli, G.**; Amore Bonapasta, A.; Fiorentini, V.  
*Phys. Rev. B* **2011**, *84*, 033201.  
DOI: 10.1103/PhysRevB.84.033201  
*Bound states of the Fe impurity in wurtzite GaN from hybrid density-functional calculations.*  
WOS citations: 12 SCOPUS citations: 13  
IF 3.813 (Journal Citation Reports 2017)

**[P21] Mattioli, G.\***; Filippone, F.; Alippi, P.; Giannozzi, P.; Amore Bonapasta, A.

*J. Mater. Chem.* **2012**, *22*, 440.

DOI: 10.1039/c1jm13605d

*A hybrid zinc phthalocyanine/zinc oxide system for photovoltaic devices: a DFT and TDDFT theoretical investigation.*

WOS citations: 19

SCOPUS citations: 20

IF 6.626 (Journal Citation Reports 2013)

**[P22] Mattioli, G.\***; Melis, C.; Mallocci, G.; Filippone, F.; Alippi, P.; Giannozzi, P.; Mattoni, A.; Amore Bonapasta, A.

*J. Phys. Chem. C* **2012**, *116*, 15439.

DOI: 10.1021/jp303781v

*Zinc Oxide–Zinc Phthalocyanine Interface for Hybrid Solar Cells.*

WOS citations: 26

SCOPUS citations: 27

IF 4.484 (Journal Citation Reports 2017)

**[P23] Mattioli, G.\***; Giannozzi, P.; Amore Bonapasta, A.; Guidoni L.

*J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 15353.

DOI: 10.1021/ja401797v

*Reaction Pathways for Oxygen Evolution Promoted by Cobalt Catalyst.*

WOS citations: 110

SCOPUS citations: 113

IF 14.357 (Journal Citation Reports 2017)

**[P24] Colonna, S.; Mattioli, G.\***; Alippi, P.; Amore Bonapasta, A.; Cricenti, A.; Filippone, F.; Gori, P.; Paoletti, A. M.; Pennesi, G.; Ronci, F.; Zanotti, G.

*J. Phys. Chem. C* **2014**, *118*, 5255.

DOI: 10.1021/jp409847v

*Supramolecular and Chiral Effects at the Titanyl Phthalocyanine/Ag(100) Hybrid Interface.*

WOS citations: 5

SCOPUS citations: 5

IF 4.484 (Journal Citation Reports 2017)

**[P25] Mattioli, G.\***; Dkhil, S. B.; Saba, M. I.; Mallocci, G.; Melis, C.; Alippi, P.; Filippone, F.; Giannozzi, P.; Thakur, A. K.; Gaceur, M.; Margeat, O.; Diallo, A. K.; Videlot-Ackermann, C.; Ackermann, J.; Amore Bonapasta, A.; Mattoni, A.

*Adv. Energy Mater.* **2014**, *4*, 1301694.

DOI: 10.1002/aenm.201301694

*Interfacial Engineering of P3HT/ZnO Hybrid Solar Cells Using Phthalocyanines: A Joint Theoretical and Experimental Investigation.*

WOS citations: 23

SCOPUS citations: 25

IF 21.875 (Journal Citation Reports 2017)

**[P26] Mattioli, G.\***; Amore Bonapasta, A.; Bovi, D.; Giannozzi, P.

*J. Phys. Chem. C* **2014**, *118*, 29928.

DOI: 10.1021/jp509830w

*Photocatalytic and Photovoltaic Properties of TiO<sub>2</sub> Nanoparticles Investigated by Ab Initio Simulations.*

WOS citations: 16 SCOPUS citations: 17

IF 4.484 (Journal Citation Reports 2017)

**[P27]** Amidani, L.; Ciatto, G.; Boscherini, F.; Filippone, F.; **Mattioli, G.**; Alippi, P.; Bondino, F.; Polimeni, A.; Capizzi, M.; Amore Bonapasta, A.

*Phys. Rev. B* **2014**, *89*, 085301.

DOI: 10.1103/PhysRevB.89.085301

*Connections between local and macroscopic properties in solids: The case of N in III-V-N alloys.*

WOS citations: 4 SCOPUS citations: 5

IF 3.813 (Journal Citation Reports 2017)

**[P28]** Rondino, F.; Catone, D.; **Mattioli, G.\***; Amore Bonapasta, A.; Bolognesi, P.; Casavola, A. R.; Coreno, M.; O'Keeffe, P.; Avaldi, L.

*RSC Adv.* **2014**, *4*, 5272.

DOI: 10.1039/c3ra45705b

*Competition between electron-donor and electron-acceptor substituents in nitrotoluene isomers: a photoelectron spectroscopy and ab initio investigation.*

WOS citations: 4 SCOPUS citations: 4

IF 2.936 (Journal Citation Reports 2017)

**[P29]** Pettinari, G.; Filippone, F.; Polimeni, A.; **Mattioli, G.**; Patane, A.; Lebedev, V.; Capizzi, M.; Amore Bonapasta, A.

*Adv. Funct. Mater.* **2015**, *25*, 5353.

DOI: 10.1002/adfm.201501858

*Genesis of "Solitary Cations" Induced by Atomic Hydrogen.*

WOS citations: 3 SCOPUS citations: 3

IF 13.325 (Journal Citation Reports 2017)

**[P30]** **Mattioli, G.\***; Zaharieva, I.; Dau, H.; Guidoni, L.

*J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 10254. DOI: 10.1021/jacs.5b05174

*Atomistic Texture of Amorphous Manganese Oxides for Electrochemical Water Splitting Revealed by Ab Initio Calculations Combined with X ray Spectroscopy.*

WOS citations: 17 SCOPUS citations: 17

IF 14.357 (Journal Citation Reports 2017)

**[P31]** Guarnaccio, A.; D'Auria, M.; Racioppi, R.; **Mattioli, G.**; Amore Bonapasta, A.; De Bonis, A.; Teghil, R.; Prince, K. C.; Acres, R. G.; Santagata, A.

*J. Phys. Chem. C* **2016**, *120*, 252.

DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b08733

*Thiophene-Based Oligomers Interacting with Silver Surfaces and the Role of a Condensed Benzene Ring.*

WOS citations: 4 SCOPUS citations: 4

IF 4.484 (Journal Citation Reports 2017)

**[P32]** Zanotti, G.; Angelini N.; **Mattioli, G.**; Paoletti, A. M.; Pennesi, G.; Rossi, G.; Caschera D.; De Marco, L.; Gigli G.  
*RSC Adv.* **2016**, 6, 5123.

DOI: 10.1039/c5ra20945e

*Metal-Organic Green Dye: Chemical and Physical Insight Into a Modified Zn- Benzoporphyrin for Dye-Sensitized Solar Cells.*

WOS citations: 7

SCOPUS citations: 8

IF 2.936 (Journal Citation Reports 2017)

**[P33]** Zanotti, G.; Angelini N.; **Mattioli, G.**; Notarantonio, S.; Paoletti, A. M.; Pennesi, G.; Rossi, G.; Caschera D.; De Marco, L.; Gigli G.

*J. Porphyr. Phthalocya.* **2016** 20, 1207.

DOI: 10.1142/S1088424616500863

*Modifications of an unsymmetrical phthalocyanine: towards stable blue dyes for Dye-Sensitized Solar Cells.*

WOS citations: 1

SCOPUS citations: 1

IF 1.217 (Journal Citation Reports 2017)

**[P34]** Alippi, P.; Lanzillotto, V.; Paoletti, A. M.; **Mattioli, G.**; Zanotti, G.; Pennesi, G.; Filippone, F.; Cossaro, A.; Verdini, A.; Morgante, A.; Amore Bonapasta A.

*Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19, 1449.

DOI:10.1039/C6CP06094C

*Ru-Ru Pair Housed in the Ruthenium Phthalocyanine: Role of a "Cage" Architecture in the Molecule Coupling with the Ag(111) Surface.*

WOS citations: 2

SCOPUS citations: 2

IF 3.906 (Journal Citation Reports 2017)

**[P35]** Narzi, D.‡; **Mattioli, G.\*‡**; Bovi, D.; Guidoni, L.

‡ first authors

*Chem-Eur. J.* **2017**, 23, 6969.

DOI: 10.1002/chem.201700722

*A Spotlight on the Compatibility between XFEL and Ab Initio Structures of the Oxygen Evolving Complex in Photosystem II*

WOS citations: 8

SCOPUS citations: 9

IF 5.160 (Journal Citation Reports 2017)

**[P36]** **Mattioli, G.\***; Larciprete, R.; Alippi, P.; Amore Bonapasta, A.; Filippone, F.; Lacovig, P.; Lizzit, S.; Paoletti, A. M.; Pennesi, G.; Ronci, F.; Zanotti, G.; Colonna, S.

*Chem-Eur. J.* **2017**, 23, 16319.

DOI: 10.1002/chem.201703255

*Unexpected Rotamerism at the Origin of a Chessboard Supramolecular Assembly of Ruthenium Phthalocyanine*

WOS citations: 1

SCOPUS citations: 2

IF 5.160 (Journal Citation Reports 2017)

**[P37]** Filippone, F.; **Mattioli, G.**; Amore Bonapasta, A.

*Phys. Rev. Materials* **2017**, 1, 064606.

DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.1.064606

*Independence of solitary-cation properties on the atomic neighborhood in  $In_{1-x}Ga_xN$  alloys: A novel perspective for material engineering*

WOS citations: 0

SCOPUS citations: 0

IF n.d.

**[P38]** Zanotti, G.; **Mattioli, G.**; Paoletti, A. M.; Pennesi, G.; Caschera, D.; Maman, N.; Visoly-Fisher, I.; Misra, R. K.; Etgar, L.; Katz, E.

*Int. J. Photoenergy* **2018**, 2018, 2473152.

DOI: 10.1155/2018/2473152

*A Solution-Processed Tetra-Alkoxyated Zinc Phthalocyanine as Hole Transporting Material for Emerging Photovoltaic Technologies*

WOS citations: 0

SCOPUS citations: 0

IF 1.547 (Journal Citation Reports 2017)

**[P39]** Zanotti, G.; Angelini N.; **Mattioli, G.**; Paoletti, A. M.; Pennesi, G.; Rossi, G.; Caschera D.; De Marco, L.; Gigli G.

*RSC Adv.* **2018**, 8, 20259.

DOI: 10.1039/c8ra00213d

*Reply to the 'Comment on "metal-organic green dye: Chemical and physical insight into a modified Zn-benzoporphyrin for dye-sensitized solar cells"' by R. Steer*

WOS citations: 0

SCOPUS citations: 0

IF 2.936 (Journal Citation Reports 2017)

**[P40]** Castrovilli, M. C.; Bolognesi, P.; Bodo, E.; **Mattioli, G.**; Cartoni, A.; Avaldi, L.

*Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, 20, 6657.

DOI: 10.1039/c8cp00026c

*An experimental and theoretical investigation of XPS and NEXAFS of 5-halouracils*

WOS citations: 0

SCOPUS citations: 0

IF 3.906 (Journal Citation Reports 2017)

**[P41]** Sanzone, A.; Calascibetta, A.; Ghiglietti, E.; Ceriani, G.; **Mattioli, G.**; Mattiello, S.; Sassi, M.; Beverina, L.

*J. Org. Chem.* **2018**, 83, 15029.

*Suzuki–Miyaura Micellar One-Pot Synthesis of Symmetrical and Unsymmetrical 4,7-Diaryl-5,6-difluoro-2,1,3-benzothiadiazole Luminescent Derivatives in Water and under Air*

WOS citations: 0

SCOPUS citations: 0

IF 4.805 (Journal Citation Reports 2017)

Attività di revisione di  
articoli

*Attività di revisione continuativa a partire dal 2008, documentabile sulle piattaforme editoriali online dei maggiori editori di riviste nell'ambito della chimica e della scienza dei materiali (American Chemical Society, Royal Society of Chemistry, AIP Publishing, John Wiley & Sons, etc.): sono state valutate come reviewer decine di articoli su riviste internazionali, incluse (ma non limitate a) Account of Chemical Research, NanoLetters, Journal of the*

American Chemical Society, Advanced Functional Materials, Advanced Energy Materials, ACS Energy Letters, Journal of Materials Chemistry, Chemistry of Materials, Nanoscale, Journal of Physical Chemistry, Physical Chemistry Chemical Physics, Journal of Chemical Physics.



**Invited talk @FISMAT-2017**