

CURRICULUM dell'attività scientifica e didattica di Alice Ruini

Dati personali

Luogo e data di nascita: Modena, 11 Marzo 1969
Nazionalità: Italiana
Posizione attuale: Professore Associato (tempo pieno) di Fisica della Materia (FIS03) presso il Dipartimento di Scienze Fisiche, Informatiche e Matematiche (FIM) dell'Università di Modena e Reggio Emilia
Indirizzo: Edificio di Fisica, via G. Campi 213/A, 41100, Modena (Italia)
Telefono: +39 59 2058380
E-mail: alice.ruini@unimore.it
ORCID: 0000-0002-7987-1858
ResearcherID: D-2774-2011
Scopus Author ID: 6603475215

Titoli

Abilitazione Scientifica Nazionale a professore di prima fascia, SSD FIS03 (2016)

PhD in Teoria degli Stati Condensati (equipollente al Dottorato di Ricerca in Fisica a norma di legge) presso la Scuola Internazionale di Studi Superiori Avanzati (SISSA) di Trieste, il 24 ottobre 1997

Tesi: "Dynamical Charges at Surfaces and Interfaces: Their Role in the Schottky Barrier problem"
Supervisor: Prof. Raffaele Resta e Prof. Stefano Baroni

Diploma di Perfezionamento "Magister Philosophiae" (Master) in Teoria Stati Condensati presso la Scuola Internazionale di Studi Superiori Avanzati (SISSA) di Trieste, il 17 ottobre 1995

Tesi: "Schottky Barrier in Al/GaAs junctions"
Supervisor: Prof. Raffaele Resta e Prof. Stefano Baroni

Diploma di Perfezionamento in Metodologie dell'Ingegneria presso la Facoltà di Ingegneria dell'Università di Modena, conseguito nel gennaio 1998.

Diploma di Perfezionamento in Didattica della Fisica presso il Consorzio Interuniversitario di Formazione per la Comunicazione, promosso e fondato dall'Università di Roma "La Sapienza", conseguito il 17 dicembre 1997.

Abilitazione all'Insegnamento Secondario, conseguita in occasione del Concorso ordinario per esami e titoli D.D. 31/03/1999 – 12/07/1999, nelle seguenti classi di concorso:

- Matematica (A047);
- Fisica (A038);
- Matematica e Fisica (A049);
- Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali nella Scuola Media (A059).

Laurea in Fisica presso l'Università di Modena, il 28 luglio 1994, con tesi dal titolo: "Interazione elettrone-elettrone in sistemi mesoscopici e a bassa dimensionalità", *Supervisore:* Prof. C. Jacoboni, *Voto:* 110/110 *cum laude*

Diploma di maturità: Liceo Scientifico "A. Tassoni" (Modena), *Voto:* 60/60

Posizioni lavorative

- **dal 1 novembre 2015 ad oggi:** Professore associato (02B2) presso il Dipartimento di Scienze Fisiche, Informatiche e Matematiche dell'Università di Modena e Reggio Emilia.
- **dal 18 gennaio 2005 al 31 ottobre 2015:** Ricercatrice universitaria (02/B2) presso il Dipartimento di Scienze Fisiche, Informatiche e Matematiche dell'Università di Modena e Reggio Emilia.
- **1 febbraio 2003 - 17 gennaio 2005:** Borsa di Ricerca e Formazione Avanzata di Ateneo presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Modena e Reggio Emilia, sotto la supervisione della Prof. Elisa Molinari. Tema di ricerca: Studio da principi primi di nuovi sistemi organici nanostrutturati.
- **25 novembre - 9 dicembre 2001:** Soggiorno in qualità di "Visiting Scientist" presso Universidade de São Paulo (Brasile), nell'ambito di un progetto di cooperazione Italia-Brasile relativo ad un accordo bilaterale tra CNR e CNPq.
- **1 febbraio 1999 - 31 gennaio 2003:** Assegno di Ricerca " Post-doc " presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Modena e Reggio Emilia sotto la supervisione della Prof. Elisa Molinari. Tema di ricerca: Teoria delle proprietà ottiche e degli effetti di correlazione coulombiana in polimeri semiconduttori.
- **1 novembre 1997 - 31 ottobre 1998:** Borsa di Ricerca "Post-doc" presso l'Unità di Ricerca di Modena dell'Istituto Nazionale di Fisica della Materia nel gruppo di Nanoscienza Teorica della Prof. Elisa Molinari. Tema di ricerca: Proprietà ottiche ed elettroniche di sistemi a bassa dimensionalità
- **1 novembre 1994 - 31 ottobre 1997:** Borsa di Studio per la frequenza della Scuola Superiore di Studi Superiori Avanzati di Trieste ai fini del conseguimento del Titolo di PhD in Teoria degli Stati Condensati.

Incarichi ricoperti

2022 delega permanente a rappresentare l'Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia nell'Assemblea dei soci della Fondazione Centro Nazionale di Ricerca in High-Performance Computing, Big data and Quantum Computing

Dal 2017: Associazione con Incarico di ricerca all'Istituto Nanoscienze CNR

Dal 2015/16: Membro del Collegio Docenti della Scuola di Dottorato in "Physics and Nanoscience", UNIMORE

2014/15, 2015/16, 2017/18, 2020/21, 2021/22: Membro di Commissione per l'ammissione alla Scuola di Dottorato in "Physics and Nanoscience", UNIMORE

Membro di Commissione in diversi concorsi (RTD-B, RTD-A, post-doc positions), e per esami finali di Dottorato (e.g. Università di Cagliari, Université de Cergy-Pontoise, Paris, Università di Modena e Reggio Emilia); Referee per candidati al PhD (Università nazionali e internazionali).

2020: Membro del Comitato scientifico della Fondazione 'Angelo Della Riccia'

2013/14 – 2017/18: Membro della Commissione Ricerca di Dipartimento

Dal 2018/19: Delegato alla Ricerca di Dipartimento

Dal 2018/19: Membro della Giunta di Dipartimento

Attività di ricerca scientifica

La ricerca è rivolta alla comprensione delle proprietà (strutturali, elettroniche, di trasporto, ottiche,...) di materiali, sviluppando ed utilizzando metodi teorico/computazionali che sfruttano schemi da principi primi e tecniche HPC. Recentemente i suoi studi hanno riguardato sistemi quantistici nanostrutturati e a bassa dimensionalità, come polimeri, nanotubi di carbonio, nanonastri di grafene e superfici ibride funzionalizzate, considerando sia aspetti fondamentali che aspetti applicativi, in particolare in ambito energetico (e.g. fotovoltaico, batterie) e ICT (e.g. elettronica basata su materiali 2D).

Pubblicazioni scientifiche

Le pubblicazioni scientifiche su rivista e su volume sono elencate in **Appendice A**.

I corrispondenti parametri sintetici (da Scopus su 82 pubblicazioni rilevate al 30/08/2022) sono:

- h index = 25
- numero articoli citanti = 2173
- numero totale di citazioni = 2749

Presentazioni a conferenze

Presenta i suoi lavori partecipando a numerose conferenze nazionali ed internazionali, anche su invito (la lista delle 11 presentazioni ad invito è in **Appendice B**).

Organizzazione di conferenze

2015 Organizzazione del Workshop “Fisica@Modena” (18 dicembre) c/o Dipartimento di Scienze Fisiche, Informatiche e Matematiche, UNIMORE, finanziato di FCRMO

2005 Responsabilità e coordinamento della “topical session” su “Nanotubes and nanowires: electronics and optics”, *MMD Meeting 2005*, Genova (Italia).

Coordinamento di progetti scientifici

2022 Co-PI di EUMaster4HPC, nell’ambito di EuroHPC Joint Undertaking, progetto mirato a pianificare ed implementare il primo programma di Master HPC pan-europeo (H2020-JTI-EuroHPC-2020-03)

2022 Co-PI dello Spoke 6 “Ecological transition based on HPC and Data Technology” Ecosistema dell’innovazione (PNRR)

2022 Referente UNIMORE per lo Spoke 7 “Materials and Molecular Sciences” del Centro Nazionale di Ricerca HPC, Big data e Quantum Computing (PNRR)

2020 Coordinatore nazionale di una proposta progettuale PRIN dal titolo “Light-Activated Torsional Switches towards Integrity Temperature Sealing”

2020 Co-PI di un progetto FAR-Strumentazione di Ateneo per l’acquisto di un sistema di calcolo (hardware) ad alte prestazioni costituito da 4 nodi

2017 Coordinamento di un progetto FAR-2017 dipartimentale dal titolo “Ab initio simulation of optical and vibrational spectroscopies in graphene nanoribbons”, durata 24 mesi.

2015 Coordinamento di un progetto finanziato dalla Fondazione Cassa di Risparmio di Modena per l’organizzazione e la realizzazione di una conferenza dal titolo “Physics@Modena – Connecting stories, people and future”

2014 Coordinamento di un progetto di ricerca della Linea Strategica di Ateneo, WP4, (2014) "Indagine teorica di nanostrutture innovative a base di ossidi metallici per applicazioni avanzate di raccolta dell'energia solare", 24 mesi di Assegno Post-Doc

2010 Coordinamento di un progetto di collaborazione con l'Università di Sao Paulo nell'ambito del programma dell'Università di Modena e Reggio Emilia per la promozione della mobilità degli scienziati (visita/soggiorno dello studente di dottorato L.M.M. Jorge).

2002-2006 Co-coordinamento del Nodo di Modena per il Network Europeo "EXCITING" No. HPRN-CT-2002-00317 "First-Principles Approach to the Optical Properties of Solids", Fifth Framework Program.

2002 Coordinamento di un progetto INFM del Ministero Affari Esteri dal titolo "Proprietà ottiche ed elettroniche di materiali organici", per la collaborazione scientifica con l'Università di Sao Paulo, Brasile; tale progetto ha consentito di effettuare scambi di ricercatori tra Italia e Brasile, e di ottenere risorse per il calcolo scientifico.

Progetti di supercalcolo

2021 Coordinamento di un progetto scientifico di supercalcolo ISCRA-CINECA dal titolo "organic functionalization can improve Mechanical properties of ANodes in Li-BATteries" (MAN-BAT)

2018 Coordinamento di un progetto scientifico di supercalcolo ISCRA-CINECA dal titolo "Raman features in Graphene NanORibbons: interpretation from ab-initio calculations" (RAGNO)

2017 Coordinamento di un progetto scientifico di supercalcolo ISCRA-CINECA dal titolo "Vibrational fingerprints in Graphene nanORibbons" (VIGOR)

2014 Coordinamento di un progetto di supercalcolo ISCRA-CINECA "Optical properties of experimentally feasible GRaphene NAnoribbons" (GRANA).

2013 Coordinamento di un progetto di supercalcolo ISCRA-CINECA "OPTical Limit in orgAnic molecules" (OPLA).

2011 Coordinamento di un progetto di supercalcolo ISCRA-CINECA "Designing Optoelectronic properties of pOlymer cRystals" (DOOR).

2010 Coordinamento di un progetto di supercalcolo ISCRA-CINECA "oPtoelectronic beHavior Of TiO2 Nanoparticles upon organic functionalization" (PHOTON).

2008 (con estensione nel 2009) Coordinamento di un progetto di Supercalcolo presso il Cineca (Bologna): "First-Principles Simulation of Near-Field Optical Spectra in Organic Polymers".

2007 Coordinamento di un progetto Supercalcolo presso il Cineca (Bologna): "Excitons in graphene nanoribbons and nanotubes".

2006 Coordinamento di due progetti Supercalcolo presso il Cineca (Bologna): "Kinetics for the formation of organic layers on hydrogenated silicon surfaces" e "Ab initio investigation of luminescence properties in organic semiconductors and amorphous systems" (25000 ore CPU), "Structural and transport properties of organic crystals"

2005 Coordinamento di due progetti Supercalcolo presso il Cineca (Bologna): "Optoelectronic properties of organic molecular crystals" e "Thermodynamics and kinetics of organic molecules on hydrogenated silicon surfaces"

Referaggio

Svolge attività di Review Editor per la rivista "Frontiers in Physics".

Svolge attività di referaggio per numerose riviste scientifiche (Physical Review Letters, Physical Review B, RCS Advances. Nanotechnology, Journal of Chemical Physics, Chemical Physics, etc). Svolge attività di referaggio di progetti nazionali (e.g. REPRISE, CINECA) e internazionali (e.g. ERC-Starting, University of Nova Gorica).

Attività didattica

Docenza

2002/03-2003/04: Docenza per il Corso di Complementi di Metodi Matematici del Master universitario post-laurea in "Finanza Computazionale e Gestione del Rischio", UNIMORE

2005/06 - oggi: Docenza per il Corso di Fisica Generale II (6 CFU), LT Chimica, UNIMORE.

2015/16 - oggi: Docenza per il Corso di Fisica dello Stato solido (6 CFU), LT Fisica, UNIMORE.

2017/18 - oggi: Docenza per il Corso di Laboratory of Quantum Simulation of Materials (6 CFU), LM Physics, UNIMORE.

Esercitazioni

1999/2000-2002/03: Esercitazioni di Struttura della Materia, Corso di Laurea in Fisica, UNIMORE.

2001/02: Esercitazioni di Fisica B per il Corso di Laurea in Ingegneria Gestionale, UNIMORE.

2004/05 Esercitazioni di Fisica dello Stato Solido per il Corso di Laurea in Fisica, UNIMORE.

Supervisione e tutoraggio

E' relatrice/correlatrice di tesi per studenti di Laurea Triennale e Laurea Magistrale in Fisica, e supervisiona/co-supervisiona assegnisti di ricerca e post-doc.

Svolge inoltre attività di relatrice/correlatrice per Studenti di Dottorato [Simone Vacondio (in corso) – “Higher order many-body perturbation theory applied to atomic systems” (titolo provvisorio); Alberto Guandalini – “Charged and nonlinear neutral excitations in low-dimensional and molecular systems by means of density-functional approaches”; Luigi Cigarini - “Towards hybrid thermoelectrics: a theoretical approach”, Marzio De Corato - “Vibrational and optical fingerprints in graphene-based nanostructures”; Benedetta Bonferroni - “Real space description of electronic and transport properties of hybrid interfaces”, Deborah Prezzi - “Optical excitations in low-dimensional Carbon-based systems”; Clotilde Cucinotta - “Thermodynamics and Kinetics for Chemisorption on Silicon Substrates”; Giovanni Bussi - “Excited states in low-dimensional systems”].

Attività di divulgazione scientifica

2017, 2019, 2020, 2021, 2022 Seminari e attività di laboratorio (prevalentemente legate alla simulazione computazionale di proprietà di diversi materiali) rivolti agli studenti delle classi quarte delle Scuole superiori di Modena e Reggio Emilia, nell'ambito dell'iniziativa "Una Settimana da Scienziato"

2016 Seminario di carattere divulgativo dal titolo "Il grafene delle meraviglie", organizzato dalla Società dei Naturalisti e Matematici di Modena, 24/11/2016 c/o Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche

2015 Seminario di carattere divulgativo rivolto principalmente ai docenti e agli studenti delle classi quinte delle Scuole superiori di Modena e Reggio Emilia dal titolo "Simulare la materia con i computer" nell'ambito dell'iniziativa Physics Class, c/o Dipartimento di Scienze Fisiche, Informatiche e Matematiche

2011 Seminario a carattere divulgativo dal titolo "Polimeri conduttivi", nell'ambito dell'iniziativa NANOLAB – I corso di aggiornamento teorico-pratico su nanoscienze e tecnologie per insegnanti di scuola superiore, Dipartimento di Fisica dell'Università di Modena e Reggio Emilia. 22 novembre

2010-2011 Seminari ed esercitazioni di "laboratorio computazionale" per gli studenti delle scuole superiori nell'ambito del college FareFisica presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Modena

2007 Seminario dal titolo "Fisica e ricerca: costruire modelli e simulare la materia" per studenti e docenti della scuola superiore (6 novembre) e organizzazione di uno stage sul tema "Simulare i materiali" per gli studenti della scuola superiore (7 novembre), nell'ambito dell'iniziativa "La formazione del fisico dalla Scuola Superiore all'Università e al mondo del lavoro", organizzata dal Dipartimento di Fisica dell'Università di Modena e Reggio Emilia.

2006 Conduzione di visite guidate a studenti delle scuole medie inferiori e superiori per la mostra di divulgazione scientifica "Blow-up", Foro Boario (Modena).

2003 Partecipazione al coordinamento di una mostra di divulgazione sulla ricerca e l'impegno civile di Linus Pauling (Nobel per la Chimica e per la Pace), Chiesa di San Vincenzo (Modena); tale attività ha riguardato anche la collaborazione con le scuole medie inferiori e superiori della Provincia di Modena per l'organizzazione e la conduzione di visite guidate per scolaresche e di incontri di formazione per insegnanti.

1998 Traduzione dall'inglese all'italiano del libro di divulgazione scientifica "Matematica", di Ron van der Meer e Bob Gardner, Franco Cosimo Panini Editore.

APPENDICE A

Elenco pubblicazioni su riviste (con referaggio)

1. S. Vacondio, D. Varsano, A. Ruini, A. Ferretti, "Numerically precise benchmark of many-body self-energies on spherical atoms", *Journal of Chemical Theory and Computation* 18, 3703–3717 (2022)
2. M. Bonacci, M. Zanfrognini, E. Molinari, A. Ruini, M. J. Caldas, A. Ferretti, D. Varsano, "Excitonic effects in graphene-like C₃N", *Phys. Rev. Mat.* 6, 034009 (2022)
3. A. Götz, X.-Y. Wang, A. Ruini, W. Zheng, P. Soltani, R. Graf, A. Tries, J. Li, C. A. Palma, E. Molinari, M. R. Hansen, H. Wang, D. Prezzi, K. Muellen, A. Narita, "Band Structure Modulation by Methoxy-Functionalization of Graphene Nanoribbons", *Journal of Materials Chemistry C* 10, 4173-4181 (2022)
4. A. Guandalini, S. Pittalis, E. Räsänen, A. Ruini, C. A. Rozzi, "Density functional approach to the band gaps of finite and periodic two-dimensional systems", *Phys. Rev. B* 104, 085110 (2021)
5. A. Guandalini, C. Cocchi, S. Pittalis, A. Ruini, C. A. Rozzi, "Nonlinear light absorption in many-electron systems excited by an instantaneous electric field: a non-perturbative approach", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 23, 10059-10069 (2021)
6. N. Cavani, M. De Corato, A. Ruini, D. Prezzi, E. Molinari, A. Lodi Rizzini, A. Rosi, R. Biagi, V. Corradini, X.Y. Wang, X. L. Feng, A. Narita, K. Mullen, V. De Renzi, "Vibrational signature of the graphene nanoribbon edge structure from high-resolution electron energy-loss spectroscopy", *Nanoscale* 12, 19681-19688 (2020)
7. D. Rizzo, D. Prezzi, A. Ruini, V. Nagyte, A. Keerthi, A. Narita, U. Beser, F.G. Xu, Y.Y. Mai, X.L. Feng, K. Mullen, E. Molinari, C. Casiraghi, "Multiwavelength Raman spectroscopy of ultranarrow nanoribbons made by solution-mediated bottom-up approach", *Phys. Rev. B* 100, 045406 (2019)
8. Y.B. Hu, P. Xie, M. De Corato, A. Ruini, S. Zhao, F. Meggendorfer, L.A. Straaso, L. Rondin, P. Simon, J. Li, J.J. Finley, M.R. Hansen, J.S. Lauret, E. Molinari, X.L. Feng, J.V. Barth, C.A. Palma, D. Prezzi, K. Mullen, A. Narita, "Bandgap Engineering of Graphene Nanoribbons by Control over Structural Distortion", *J. Am. Chem. Soc.* 140, 7803-7809 (2018)
9. L. Cigarini, A. Ruini, A. Catellani, A. Calzolari, "Conflicting effect of chemical doping on the thermoelectric response of ordered PEDOT aggregates", *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, 5021-5027 (2018).
10. T. Virgili, A. Calzolari, I. Suárez López, A. Ruini, A. Catellani, B. Vercelli, F. Tassone, "Hybridized electronic states between CdSe nanoparticles and conjugated organic ligands: A theoretical and ultrafast photo-excited carrier dynamics study" *Nano Research* 11, 142-150 (2018).
11. S. Benedetti, I. Valenti, A. di Bona, G. Vinai, C. Castan-Guerrero, S. Valeri, A. Catellani, A. Ruini, P. Torelli, A. Calzolari, "Spectroscopic identification of the chemical interplay between defects and dopants in Al-doped ZnO", *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19, 29364-29371 (2017).
12. P. D'Amico, A. Calzolari, A. Ruini, A. Catellani, "New energy with ZnS: novel applications for a standard transparent compound", *Scientific Reports* 7, 16805 (2017).
13. L. Cigarini, A. Ruini, A. Catellani, A. Calzolari, "Thermoelectric figure of merit of polymeric systems for low-power generators", *J. of Physics D-Applied Physics* 50, 395502 (2017).

14. R. Denk, A. Lodi-Rizzini, S. Wang, M. Hohage, P. Zeppenfeld, J. Cai, R. Fasel, P. Ruffieux, R. F. J. Berger, Z. Chen, A. Narita, X. Feng, K. Müllen, R. Biagi, V. De Renzi, D. Prezzi, D.; A. Ruini, A. Ferretti, "Probing optical excitations in chevron-like armchair graphene nanoribbons", *Nanoscale* 9, 18326-18333 (2017).
15. P. D'Amico, L. Agapito, A. Catellani, A. Ruini, S. Curtarolo, M. Fornari, M. B. Nardelli, A. Calzolari, "Accurate ab initio tight-binding Hamiltonians: Effective tools for electronic transport and optical spectroscopy from first principles", *Physical Review B* 94, 165166 (2016).
16. I. A. Verzhbitskiy, M. De Corato, A. Ruini, E. Molinari, A. Narita, Y. Hu, M. G. Schwab, M. Bruna, D. Yoon, S. Milana, X. Feng, K. Muellen, A. C. Ferrari, C. Casiraghi, D. Prezzi, "Raman Fingerprints of Atomically Precise Graphene Nanoribbons", *Nano Letters* 16, 3442 (2016)
17. A. Catellani, A. Ruini, A. Calzolari, "Optoelectronic properties and color chemistry of native point defects in Al:ZnO transparent conductive oxide", *Journal of Materials Chemistry C* 3, 8419 (2015)
18. A. Catellani, A. Ruini, M. B. Nardelli, A. Calzolari, "Unconventional co-existence of plasmon and thermoelectric activity in In:ZnO nanowires", *RSC Advances* 5, 44865 (2015)
19. M. De Corato, C. Cocchi, D. Prezzi, M. J. Caldas, E. Molinari, A. Ruini, "Optical Properties of Bilayer Graphene Nanoflakes", *Journal of Physical Chemistry C* 118, 23219 (2014).
20. C. Cocchi, D. Prezzi, A. Ruini, M. J. Caldas, E. Molinari, "Anisotropy and Size Effects on the Optical Spectra of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons", *Journal of Physical Chemistry A* 118, 6507 (2014).
21. A. Calzolari, A. Ruini, A. Catellani, "Transparent Conductive Oxides as Near-IR Plasmonic Materials: The Case of Al-Doped ZnO Derivatives", *ACS Photonics* 1, 703 (2014).
22. R. Denk, M. Hohage, P. Zeppenfeld, J. M. Cai, C. A. Pignedoli, H. Sode, R. Fasel, X. L. Feng, K. Mullen, S. D. Wang, D. Prezzi, A. Ferretti, A. Ruini, E. Molinari, P. Ruffieux, "Exciton-dominated optical response of ultra-narrow graphene nanoribbons", *Nature Communications* 5, 4253 (2014).
23. C. Cocchi, D. Prezzi, A. Ruini, E. Molinari, C. A. Rozzi, "Ab Initio Simulation of Optical Limiting: The Case of Metal-Free Phthalocyanine", *Physical Review Letters* 112, 198303 (2014).
24. G. F. Arnaud, V. De Renzi, U. del Pennino, R. Biagi, V. Corradini, A. Calzolari, A. Ruini, A. Catellani, "Nitrocatechol/ZnO Interface: The Role of Dipole in a Dye/Metal-Oxide Model System", *Journal of Physical Chemistry C* 118, 3910 (2014).
25. A. Catellani, A. Calzolari, A. Ruini, "Effect of ultrathin gold on the Ohmic-to-Schottky transition in Al/ZnO contacts: A first-principles investigation", *J. Appl. Phys.* 115, 043711 (2014).
26. A. Calzolari, B. Vercelli, A. Ruini, T. Virgili, M. Pasini, "Fluorine-Induced Enhancement of the Oxidation Stability and Deep-Blue Optical Activity in Conductive Polyfluorene Derivatives", *Journal of Physical Chemistry C* 117, 26760 (2013).
27. A. Catellani, A. Ruini, G. Cicero, A. Calzolari, "First principles description of the electronic properties of doped ZnO", *Phys. Status Solidi B – Basic Solid State Physics* 250, 2106 (2013).
28. N. Richard, L. Martin-Samos, S. Girard, A. Ruini, A. Boukenter, Y. Ouerdane, J. P. Meunier, "Oxygen deficient centers in silica: optical properties within many-body perturbation theory", *J. of Physics – Condensed Matter* 25, 335502 (2013).
29. C. Cocchi, D. Prezzi, A. Ruini, M. J. Caldas, A. Fasolino, E. Molinari, "Concavity Effects on the Optical Properties of Aromatic Hydrocarbons", *Journal of Physical Chemistry C* 117, 12909 (2013).
30. T. Virgili, A. Calzolari, I.S. Lopez, B. Vercelli, G. Zotti, A. Catellani, A. Ruini, F. Tassone, "Charge Separation in the Hybrid CdSe Nanocrystal-Organic Interface: Role of the Ligands Studied by Ultrafast Spectroscopy and Density Functional Theory", *Journal of Physical Chemistry C* 117, 5969 (2013).

31. C. Cocchi, D. Prezzi, A. Ruini, M. J. Caldas, E. Molinari, "Electronics and Optics of Graphene Nanoflakes: Edge Functionalization and Structural Distortions", *Journal of Physical Chemistry C* 116, 17328 (2012). ISSN: 1932-7447
32. A. Calzolari, A. Ruini, A. Catellani, "Surface Effects on Catechol/Semiconductor Interfaces", *Journal of Physical Chemistry C* 116, 17158 (2012). ISSN: 1932-7447
33. A. Ferretti, G. Mallia, L. Martin-Samos, G. Bussi, A. Ruini, B. Montanari, N. Harrison, "Ab initio complex band structure of conjugated polymers: Effects of hybrid density functional theory and GW schemes", *Physical Review B* 85, 235105 (2012) ISSN: 1098-0121
34. C. Cocchi, D. Prezzi, A. Ruini, E. Benassi, M. J. Caldas, S. Corni, E. Molinari, "Optical Excitations and Field Enhancement in Short Graphene Nanoribbons", *Journal of Physical Chemistry Letters* 3, 924 (2012). ISSN 1948-7185
35. D. Prezzi, D. Varsano, A. Ruini, and E. Molinari, "Quantum dot states and optical excitations of edge-modulated graphene nanoribbons", *Physical Review B* 84, 041401(R) (2011) ISSN: 1098-0121
36. C. Cocchi, D. Prezzi, A. Ruini, M. J. Caldas, E. Molinari, "Optical Properties and Charge-Transfer Excitations in Edge-Functionalized All-Graphene Nanojunctions", *Journal of Physical Chemistry Letters* 2, 1315 (2011). ISSN: 1948-7185
37. L. Martin-Samos, G. Bussi, A. Ruini, E. Molinari, M. J. Caldas, "SiO₂ in density functional theory and beyond", *physica status solidi (b)* 248, 1061 (2011).
38. A. Calzolari, A. Ruini, A. Catellani, "Anchor Group versus Conjugation: Toward the Gap-State Engineering of Functionalized ZnO(10-10) Surface for Optoelectronic Applications", *Journal of the American Chemical Society* 133, 5893 (2011). ISSN: 0002-7863
39. C. Cocchi, A. Ruini, D. Prezzi, M. J. Caldas, E. Molinari, "Designing All-Graphene Nanojunctions by Covalent Functionalization", *Journal of Physical Chemistry C* 115, 2969 (2011). ISSN: 1932-7447
40. A. Calzolari, A. Ruini, C. Cavazzoni, M. J. Caldas, "Substitutional Impurities in PPV Crystals: An Intrinsic Donor-Acceptor System for High V_{oc} Photovoltaic Devices", *Journal of Physical Chemistry C* 114, 19535 (2010). ISSN: 1932-7447
41. A. Calzolari, S. Monti, A. Ruini, A. Catellani, "Hydration of cyanin dyes", *Journal of Chemical Physics* 132, 114304 (2010). ISSN: 1089-7690
42. L. Martin-Samos, G. Bussi, A. Ruini, E. Molinari, M. J. Caldas, "Unraveling effects of disorder on the electronic structure of SiO₂ from first-principles", *Physical Review B* 81, 081202(R) (2010). ISSN: 1098-0121
43. A. Calzolari, D. Varsano, A. Ruini, A. Catellani, R. Tel-Vered, H. B. Yildiz, O. Ovits, I. Willner, "Optoelectronic Properties of Natural Cyanin Dyes", *Journal of Physical Chemistry A* 113, 8801 (2009). ISSN 1089-5639
44. L. Zoppi, A. Calzolari, A. Ruini, A. Ferretti, M. J. Caldas, "Defect-induced effects on carrier migration through one-dimensional poly(para-phenylenevinylene) chains", *Physical Review B* 78, 165204 (2008). ISSN: 1098-0121
45. C.S. Cucinotta, A. Ruini, E. Molinari, C.A. Pignedoli, A. Catellani, M.J. Caldas, "Competitive chemisorption of bifunctional carboxylic acids on H:Si(100): a first-principles study", *Journal of Physical Chemistry C* 112, 10167 (2008). ISSN: 1932-7447
46. B. Bonferroni, A. Ferretti, A. Calzolari, A. Ruini, M. J. Caldas, and E. Molinari, "Oxygen-mediated electron transport through hybrid silicon-organic interfaces", *Nanotechnology* 19, 285201 (2008). ISSN: 0957-4484.
47. D. Prezzi, D. Varsano, A. Ruini, A. Marini, and E. Molinari, "Optical properties of graphene nanoribbons: The role of many-body effects", *Physical Review B* 77, 041404(R) (2008) ISSN: 1098-0121
48. C. Baldacchini, C. Mariani, M.G. Betti, I. Vobornik, J. Fujii, E. Annese, G. Rossi, A. Ferretti, A. Calzolari, R. Di Felice, A. Ruini, and E. Molinari, "Symmetry lowering of pentacene molecular states interacting with a Cu Surface", *Physical Review B* 76, 245430 (2007). ISSN: 1098-0121
49. D. Prezzi, D. Varsano, A. Ruini, A. Marini, and E. Molinari, "Optical properties of one-dimensional graphene polymers: the case of polyphenanthrene", *physica status solidi (b)* 244, 4124 (2007).

50. A. Ferretti, C. Baldacchini, A. Calzolari, R. Di Felice, A. Ruini, E. Molinari, and M. G. Betti, "Mixing of electronic states in pentacene adsorption on copper", *Physical Review Letters* 99, 046802 (2007) ISSN: 0031-9007
51. C. S. Cucinotta, A. Ruini, A. Catellani, and A. Stirling, "Ab initio exploration of rearrangement reactions: Intramolecular hydrogen scrambling processes in acetone", *Journal of Physical Chemistry A* 110, 14013 (2006) ISSN: 0036-0244
52. J. Maultzsch, R. Pomraenke, S. Reich, E. Chang, D. Prezzi, A. Ruini, E. Molinari, M. S. Strano, C. Thomsen, and C. Lienau, "Excitons in carbon nanotubes", *physica status solidi (b)* 243, 3204 (2006) ISSN: 0370-1972
53. C. S. Cucinotta, A. Ruini, A. Catellani, A. Stirling, "Ab initio molecular dynamics study of the keto-enol tautomerism of acetone in solution", *ChemPhysChem.* 7, 1229 (2006) ISSN:1439-4235
54. A. Calzolari, A. Ruini, M. J. Caldas, and E. Molinari, "Surface nano-patterning through styrene adsorption on Si(100)", *Physical Review B* 73, 125420 (2006) ISSN: 1098-0121
55. R. Pomraenke, J. Maultzsch, S. Reich, E. Chang, D. Prezzi, A. Ruini, E. Molinari, M. S. Strano, C. Thomsen, C. Lienau, "Two-photon photoluminescence and exciton binding energies in single-walled carbon nanotubes", *physica status solidi (b)* 243, 2428 (2006). ISSN: 0370-1972
56. C.S. Cucinotta, B. Bonferroni, A. Ferretti, A. Ruini, M.J. Caldas, and E. Molinari, "First-principles investigation of functionalization of silicon surfaces: chemisorption of unsaturated carboxylic acids", *Surface Science.* 600, 3892 (2006). ISSN: 0039-6028
57. K. Hummer, C. Ambrosch-Draxl, G. Bussi, A. Ruini, M. J. Caldas, E. Molinari, R. Laskowski, N. E. Christensen, "Ab-initio study of excitonic effects in conventional and organic semiconductors", *physica status solidi (b)* 242 (9), 1754 (2005) ISSN: 0370-1972
58. J. Maultzsch, R. Pomraenke, S. Reich, E. Chang, D. Prezzi, A. Ruini, E. Molinari, M. S. Strano, C. Thomsen, and C. Lienau, "Exciton binding energies in carbon nanotubes from two-photon photoluminescence", *Physical Review B* 72 (R), 241402 (2005) ISSN: 1098-0121
59. E. Chang, G. Bussi, A. Ruini, and E. Molinari, "First-principles approach for the calculation of optical properties of one-dimensional systems with helical symmetry: The case of carbon nanotubes", *Physical Review B* 72, 195423 (2005) ISSN: 1098-0121
60. C. S. Cucinotta, A. Ruini, A. Catellani, M. J. Caldas, "Tailoring the electronic properties of silicon with cysteine: A first-principles study", *Physical Review B* 72 (24), 245310 (2005) ISSN: 1098-0121
61. A. Ruini, "Ab initio optical absorption in conjugated polymers: the role of dimensionality", *Physica Scripta* T109, 121 (2004) ISSN: 02811847
62. A. Ferretti, A. Ruini, G. Bussi, E. Molinari, M. J. Caldas, "Ab initio study of transport parameters in polymer crystals", *Physical Review B* 69 (20), 205205 (2004) ISSN: 1098-0121
63. C. S. Cucinotta, A. Ruini, M. J. Caldas, and E. Molinari, "Ab-initio study of chemisorption reactions for carboxylic acids on hydrogenated silicon surfaces", *Journal of Physical Chemistry B* 108, 17278 (2004) ISSN: 1520-6106
64. E. Chang, G. Bussi, A. Ruini, and E. Molinari "Excitons in carbon nanotubes: an ab initio symmetry-based approach", *Physical Review Letters* 92, 196401 (2004) ISSN: 0031-9007
65. A. Ruini, A. Ferretti, G. Bussi, E. Molinari, and M. J. Caldas, "Relationship between structural and optoelectronic properties in semiconducting polymers", *Semiconductor Science Technology* 19, 362 (2004) ISSN: 02681242
66. A. Ferretti, A. Ruini, M. J. Caldas, and E. Molinari, "Transport properties in polymer crystals: the effect of interchain interaction", *Physical Review Letters* 90, 086401 (2003) ISSN: 0031-9007.
67. G. Bussi, A. Ferretti, A. Ruini, M. J. Caldas, and E. Molinari, "Optics and transport in conjugated polymer crystals: interchain interaction effects", *Advances in Solid. State Physics* 43, 313 (2003). ISSN: 1438-4329.
68. A. Ruini, G. Bussi, A. Ferretti, M. J. Caldas, and E. Molinari, "Charge transport and radiative recombination in polythiophene crystals: a first-principles study", *Synthetic Metals* 139, 755 (2003) ISSN: 0379-677

69. G. Bussi, A. Ruini, E. Molinari, and M.J. Caldas, P. Puschnig and C. Ambrosch-Draxl, "Interchain interaction and Davydov splitting in polythiophene crystals: an ab initio approach", *Applied Physics Letters* 80, 4118 (2002). ISSN: 0003-6951
70. A. Ruini, M. J. Caldas, G. Bussi, and E. Molinari, "Solid state effects on exciton states and optical properties of PPV", *Physical Review Letters* 88, 206403 (2002). ISSN: 0031-9007
71. A. Ruini, F. Rossi, U. Hohenester, E. Molinari, R.B. Capaz, and M.J. Caldas, "Ab-initio study of Coulomb correlated optical properties in conjugated polymers", *Synthetic Metals* 119, 257 (2001). ISSN: 0379-6779
72. A. Ruini, R. Resta, and S. Baroni, "Dynamical-charge neutrality at a crystal surface", *Physical Review B* 57, 5742 (1998). ISSN: 1098-0121
73. A. Ruini, R. Resta, and S. Baroni, "Effects of interface morphology on Schottky-barrier heights: A case study on Al/GaAs(001)", *Physical Review B* 56, 14921 (1997). ISSN: 1098-0121
74. P. Casarini, A. Ruini, and C. Jacoboni, "Dynamics of electrons in a 2D region coming from a point-contact", *Vuoto: scienza e tecnologia* 24, 33 (1995). ISSN: 0391-3155

Elenco contributi su volume

75. G. Bussi, E. Chang, A. Ruini, and E. Molinari, "A symmetrized-basis approach to excitons in carbon nanotubes", AIP (American Institute of Physics), *Physics of Semiconductors*, CP772, 1025 (2005).
76. C. Cucinotta, A. Ruini, E. Molinari, and M. J. Caldas, "Saturated carboxylic acids on silicon: a first-principles study", AIP (American Institute of Physics), *Physics of Semiconductors*, CP772, 1067 (2005).
77. M. J. Caldas, G. Bussi, A. Ruini, and E. Molinari, "Light-emitting polymers: a first-principles analysis of singlet-exciton harvesting in PPV", AIP (American Institute of Physics), *Physics of Semiconductors*, CP772, 1085 (2005).
78. A. Ruini, M. J. Caldas, G. Bussi, A. Ferretti, B. M. Silva, G. Goldoni, and E. Molinari, "Optical properties of organic materials: from single molecules to solid state", in "Radiation-Matter Interaction in Confined Systems", edited by L.C. Andreani, G. Benedek, and E. Molinari (Società Italiana di Fisica, Bologna, 2002).
79. A. Ruini, F. Rossi, E. Molinari, R. B. Capaz, M. J. Caldas, Coulomb-correlated optical properties of semiconductor conjugated polymers", ICPS-24 Proceedings, edited by V. D. Gershoni, World Scientific Publishing, Singapore 1998.
80. C. Jacoboni, P. Casarini, and A. Ruini, "Two-dimensional dynamics of electrons passing through a point-contact, in ``Quantum Transport in Ultrasmall Devices", D. K. Ferry, H. L. Grubin, C. Jacoboni, and A. Jauho Eds., Plenum Press, New York 1995, p.181.

APPENDICE B

Elenco presentazioni a conferenze su invito

1. "Ab initio computational spectroscopy applied to graphene nanoribbons", Conference 'Photoemission Tomography: Applications and Future Developments', Bad Honnef, Germany (2021)
2. "Theoretical spectroscopy of graphene nanoribbons", 107° Congresso Nazionale SIF (2021)
3. "Effects of aggregation, defects and functionalization in conjugated carbon-based nanostructures", E-MRS 2014 Spring Meeting, Lille, France (2014)
4. "Exploiting Coupling, Width Modulation and Edge Functionalization in Graphene Nanostructures", E-MRS 2013 Spring Meeting, Strasbourg, France (2013)
5. "Illuminating graphene nanostructures", E-MRS 2012 Fall Meeting, Warsaw, Poland (2012)
6. "First-principles analysis of optoelectronic properties in semiconducting polymers: The role of solid-state packing", CECAM Workshop "Modelling Electronic Processes in Molecular Scale Devices", Lyon, France (2003)
7. "Ab initio optical absorption in conjugated polymers: the role of dimensionality", Summer School of EU Research and Training Network "Exciting", Riksgården, Svezia (2003)
8. "Interchain interaction effect on the optical and electronic properties of semiconducting conjugated polymers", XXII Convegno di Fisica teorica e struttura della materia, Fai della Paganella (TN), Italia (2003)
9. "Excitonic states in conjugated polymers and oligomers", First European Meeting of EU Research and Training Network "Exciting", Graz, Austria (2002)
10. "First-principles study of Coulomb-correlated optical properties in conjugated polymers", XI Workshop on Computational Material Science (CSM 2001), Villasimius (CA), Italia (2001)
11. "Optical Properties of Semiconducting Conjugated Polymers: a First-Principles Study", CECAM Workshop on "Excited States and Electronic Spectra", Lione (Francia) (2000)
12. "First-principles study of Coulomb-correlated optical properties in conjugated polymers", Convegno Nazionale Materiali Molecolari Avanzati per Fotonica ed Elettronica, Villasimius (CA), Italia (1999)

DICHIARAZIONE

La sottoscritta Alice Ruini

attesta

la conformità al vero delle dichiarazioni rese nel presente documento ai sensi degli artt. 46 e 47 D.P.R. 445/2000.

Modena, 20/08/2022

A handwritten signature in black ink, reading "Alice Ruini". The signature is written in a cursive, flowing style with a single continuous line.