

Alice Ruini

Curriculum Vitæ

10 giugno 2025

SOMMARIO

1	DATI PERSONALI	1
2	TITOLI DI STUDIO	1
3	POSIZIONI ACCADEMICHE RICOPERTE	1
4	ATTIVITÀ DIDATTICA	2
4.1	Docenza	2
4.2	Supervisione	2
5	ATTIVITÀ SCIENTIFICA	3
5.1	Sintesi	3
5.2	Pubblicazioni e indicatori bibliometrici	4
5.3	Finanziamenti e supporto alla ricerca	4
5.4	Partecipazione a comitati scientifici e membership	6
5.5	Principali argomenti di ricerca e risultati scientifici ottenuti	6
6	ALTRE ATTIVITÀ ISTITUZIONALI E PROFESSIONALI	9
6.1	Coordinamento o partecipazione ad organi di governo	9
6.2	Comunicazione e divulgazione scientifica	9
6.3	Organizzazione di conferenze e workshop	10
6.4	Attività editoriali	10
6.5	Attività di valutazione della ricerca	10
6.6	Commissioni di selezione	11
6.7	Abilitazioni	12
A	Elenco completo delle pubblicazioni	13
A.1	Articoli su riviste internazionali	13
A.2	Contributi su monografie	19
A.3	<i>Proceeding</i> di conferenze	19
B	Principali comunicazioni a congressi	20
B.1	Comunicazioni <i>ad invito</i>	20
B.2	Principali comunicazioni orali (<i>contributed</i>)	20

1 DATI PERSONALI

Recapito lavorativo	Dipartimento di Scienze Fisiche, Informatiche e Matematiche (FIM) dell' Università di Modena e Reggio Emilia (UniMoRe), Via Campi 213/A, IT-41125 Modena
Tel - email	059 205 8380 - alice.ruini@unimore.it
Gruppo Scientifico Disciplinare	GSD 02/PHYS-04
Settore concorsuale	SC 02/B2
ORCID	0000-0002-7987-1858
RESEARCHER ID	D-2774-2011

2 TITOLI DI STUDIO

Laurea in Fisica (v.o.)

Degree obtained on July 28, 1994, from the University of Modena, with a score of 110/110 *with honors*, with a thesis titled *Electron-Electron Interaction in Mesoscopic and Low-Dimensional Systems* (Supervisor: Prof. Carlo Jacoboni)

Magister Philosophiæ in Teoria degli Stati Condensati

Titolo conseguito il 17 ottobre 1995, presso la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), Trieste, discutendo una tesi dal titolo *Schottky Barrier in Al/GaAs junctions* (Relatori: Prof. Raffaele Resta e Stefano Baroni).

Ph.D. in Teoria degli Stati Condensati

Titolo conseguito il 24 ottobre 1997 presso SISSA (Trieste), discutendo una tesi dal titolo *Dynamical Charges at Surfaces and Interfaces: Their Role in the Schottky Barrier problem* (Relatori: Prof. Raffaele Resta e Stefano Baroni)

Diploma di Perfezionamento in Metodologie dell'Ingegneria

Titolo conseguito nel gennaio 1998, presso la Facoltà di Ingegneria dell'Università di Modena.

Diploma di Perfezionamento in Didattica della Fisica

Titolo conseguito il 17 dicembre 1997, presso il Consorzio Interuniversitario di Formazione per la Comunicazione, promosso dall'Università di Roma "La Sapienza".

3 POSIZIONI ACCADEMICHE RICOPERTE

- 11/2024 – oggi Professore Ordinario, Dipartimento FIM, UniMoRe
- 11/2015 – 10/2024 Professore Associato, Dipartimento FIM, UniMoRe
- 01/2005 – 10/2015 Ricercatore Universitario, Dipartimento FIM, UniMoRe
 - 2010 – oggi Associato all'Istituto Nanoscienze del Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR-NANO), Centro S3, Modena
- 9/1997 – 2010 Associato all'Istituto Nazionale per la Fisica della Materia (INFM)
- 9/2001 *Visiting professor* presso Instituto de Fisica, Universidade de Sao Paulo, Brasile.

02/1999 - 01/2004 Borsa di Ricerca post-doc e Assegno di Ricerca, Dipartimento di Fisica, Università di Modena

11/1997 - 10/1998 Borsa di ricerca post-doc, Istituto Nazionale per la Fisica della Materia (INFN)

4 ATTIVITÀ DIDATTICA

4.1 Docenza

Attualmente svolgo attività didattica nell'ambito della Laurea Triennale (LT) in Fisica, della Laurea Magistrale (LM) Internazionale *Physics* e della LT in Chimica di UniMoRe. Precedemente, ho svolto attività didattica anche nell'ambito dei Corsi di Laurea in Matematica, Ingegneria e Master.

Di seguito sono elencanti i corsi tenuti.

A.A. da 2023/24 ad oggi Fisica della Materia (3 CFU), LT in Fisica, UniMoRe

A.A. da 2020/21 ad oggi Laboratory of Quantum Simulation of Materials (6 CFU), LM in Physics, UniMoRe

A.A. da 2005/06 ad oggi Fisica 2 (6 CFU), LT in Chimica, UniMoRe

A.A. da 2019/20 a 2020/21 Fisica B (6 CFU), LT in Matematica, UniMoRe

A.A. da 2015/16 a 2022/23 Fisica dello Stato Solido (6 CFU), LT in Fisica, UniMoRe

A.A. da 2017/18 a 2019/20 Laboratory of Computational Quantum Mechanics (6 CFU), LM in Physics, UniMoRe

A.A. da 2002/03 a 2003/04 Complementi di Metodi Matematici, Master di Specializzazione in Finanza Computazionale e Gestione del Rischio, UniMoRe

4.2 Supervisione

Supervisione di tesi di Laurea Triennale in Fisica

Marcello Vincenzi (A.A. 2024/25), Giulia Bertolini (A.A. 2022/23), Matteo Barduzzi (A.A. 2021/22), Chiara Zanolì (L.T. in Matematica, A.A. 2021/22), Paolo Fanti (A.A. 2019/20) Federica Benassi (A.A. 2019/20), Rebecca Ghidoni (A.A. 2019/20), Silvia Barbieri (A.A. 2019/20), Paola Scodino (A. A. 2018/19), Daniele Pignedoli (A.A. 2017/18)

Supervisione di tesi di Laurea Magistrale in Fisica (o Vecchio Ordinamento)

- Matteo Barduzzi - *Improving thermoelectric performance in twinning superlattices InAsSb nanowires: a combined computational/experimental study* (titolo da confermare), *in corso*, sessione di LM prevista: ottobre 2024
- Simone Vacondio - *Towards many-body perturbation theory for atomic systems* - Laurea Magistrale in Physics, 110/110 cum laude, Dipartimento FIM, UniMoRe laurea cum laude, 13 dicembre 2018
- Andrea Ferretti - *Interazioni intermolecolari in polimeri coniugati per applicazioni optoelettroniche* - Laurea in Ingegneria dei Materiali (VO), Facoltà di Ingegneria, UniMoRe laurea cum laude, 25 ottobre 2001 (A.R. correlatrice)
- Giovanni Bussi - *Proprietà ottiche di polimeri coniugati* - Laurea in Fisica (VO), Facoltà di Scienze MM. FF. e NN., UniMoRe laurea cum laude, 5 ottobre 2001 (A.R. correlatrice)

Supervisione di Dottorati di ricerca

- Vinicius Alves Bastos, (Phd School “Physics and Nanosciences”, Università di Modena e Reggio Emilia); dottorando XXXIX ciclo, Tesi (titolo da confermare): “Linear and nonlinear optical response of 2D materials by first-principles schemes”
- Simone Vacondio (Phd School “Physics and Nanosciences”, Università di Modena e Reggio Emilia); dottorando XXXV ciclo, Tesi: “Assessment of Many-body perturbation theory approximations beyond GW”
- Alberto Guandalini (Phd School “Physics and Nanosciences”, Università di Modena e Reggio Emilia); dottorando XXXII ciclo, Tesi: “Charged and nonlinear neutral excitations in low-dimensional and molecular systems by means of density-functional approaches”
- Luigi Cigarini (Phd School “Physics and Nanosciences”, Università di Modena e Reggio Emilia); dottorando XXX ciclo, Tesi: “Towards hybrid thermoelectrics: a theoretical approach”
- Marzio De Corato (Phd School “Physics and Nanosciences”, Università di Modena e Reggio Emilia); dottorando XXVIII ciclo, Tesi: “Vibrational and optical fingerprints in graphene-based nanostructures”
- Benedetta Bonferroni (Phd School “Physics and Nanosciences”, Università di Modena e Reggio Emilia); dottoranda XX ciclo, Tesi: “Real space description of electronic and transport properties of hybrid interfaces” (A.R. co-supervisor)
- Deborah Prezzi (Phd School “Physics and Nanosciences, Università di Modena e Reggio Emilia); dottoranda XX ciclo, Tesi: “Optical excitations in low-dimensional Carbon-based systems” (A.R. co-supervisor)
- Clotilde Cucinotta (Phd School “Physics and Nanosciences”, Università di Modena e Reggio Emilia); dottoranda XVIII ciclo, Tesi: “Thermodynamics and Kinetics for Chemisorption on Silicon Substrates” (A.R. co-supervisor)
- Giovanni Bussi (Phd School “Physics and Nanosciences”, Università di Modena e Reggio Emilia); dottorando XVII ciclo, Tesi: “Excited states in low-dimensional systems” (A.R. co-supervisor)

Supervisione e co-supervisione di post-doc

- Peter N. O. Gillespie – 2024-now
- Tarundeep Singh – 2024-now
- Simone Vacondio – 2023-2024
- Pino D’Amico – 2014-2016, oggi Ricercatore presso CNR-NANO
- Shudong Wang – 2013-2015, oggi Ricercatore presso Inner Mongolia University
- Deborah Prezzi – 2010-2012, oggi Primo Ricercatore presso CNR-NANO
- Layla Martin-Samos – 2005-2008, oggi Ricercatore presso CNR-IOM Democritos
- Clotilde Cucinotta 2006, oggi Group Leader and EPSRC fellow presso Imperial College London
- Eric Chang 2003 –2005
- Leena Torpo – 2003-2004, oggi supervisore per protezione da radiazioni presso Studsvik, Sweden

5 ATTIVITÀ SCIENTIFICA

5.1 Sintesi

La mia attività scientifica, nell’ambito della **teoria quantistica dei solidi**, si è concentrata sullo studio delle proprietà elettroniche ed ottiche di **polimeri, sistemi semiconduttori alla nano-scala** tipicamente basati sul carbonio (come nanotubi di carbonio e nanonastri di grafene), **ossidi e sistemi ibridi**, come interfacce metallo/semiconduttore, organico/metallo e dye/semiconduttore.

La ricerca è principalmente finalizzata alla comprensione delle proprietà fisiche (strutturali, elettroniche, di trasporto, ottiche, termoelettriche, ...) di un largo numero di sistemi e materiali, sviluppando ed utilizzando metodi teorico/computazionali che sfruttano schemi da principi primi e tecniche di calcolo ad alte prestazioni. Il potere predittivo dell'approccio metodologico utilizzato permette una comprensione profonda delle evidenze sperimentali ottenute con diverse tecniche spettroscopiche, oltre alla possibilità di contribuire in ambito *materials design and discovery*. L'attività di ricerca si caratterizza coerentemente per numerose collaborazioni con gruppi sperimentali leader nei rispettivi settori.

Recentemente le linee di ricerca hanno riguardato prevalentemente sistemi quantistici nanostrutturati e a bassa dimensionalità (sopra menzionati), considerando sia aspetti fondamentali che aspetti applicativi, in particolare in ambito energetico (ad es, fotovoltaico, batterie) e ICT (ad es. elettronica basata su materiali 2D sostenibili).

Di seguito, una sintesi delle principali linee di ricerca, declinate e dettagliate ulteriormente nella Sez. 5.5, e dei metodi utilizzati.

Principali linee di ricerca

- Eccitazioni ottiche di sistemi 0D, 1D, 2D
- Eccitazioni elettroniche ed ottiche di sistemi ibridi
- Fenomeni di trasporto elettronico e termico alla nanoscala

Principali metodi e tecniche

- Teoria del Funzionale Densità
- Many-Body Perturbation Theory: (beyond-)GW e Bethe-Salpeter
- Time-Dependent Density Functional Theory (ottica lineare e non-lineare)

5.2 Pubblicazioni e indicatori bibliometrici

Coautore di

- > 80 articoli su riviste internazionali con *referee* (tra i quali 5 Phys. Rev. Lett., 2 JACS, 1 Nat. Comm., 1 ACS Photonics);
- 2 contributi a monografie;
- 4 proceedings di conferenze con reviewer

La lista completa delle pubblicazioni è riportata nell'Allegato A.

Su *Google Scholar* sono presenti 137 entrate, 3812 citazioni, indice H = 28, i10-index = 52.

Su *ISI Web of Science* sono censite **87 pubblicazioni**. Le pubblicazioni hanno ricevuto circa > **3122 citazioni** (> 2948 senza autocitazioni), con un **H-index pari a 26** (fonte *ISI Web of KnowledgeSM*, Aprile 2024).

Nelle valutazioni VQR tutti i prodotti di cui sono co-autore proposti dalla struttura hanno ricevuto la valutazione massima (eccellente).

5.3 Finanziamenti e supporto alla ricerca

Responsabile scientifico, come *principal investigator* (PI) o co-PI, di progetti nazionali e internazionali:

2023-2025 Innovation Grant ASGAR "Atomistic Simulations of damaGe, Adhesion and dRag reDuction of graphene-based coating", ICSC - Centro Nazionale HPC, Big Data and Quantum

- Computing, con la partecipazione di Leonardo e Ferrovie dello Stato (Total Budget: 445306 €, Local: 44965 €); local PI. All'interno del progetto svolgo inoltre il ruolo di co-leader del WP1 "Adhesion and defect formation in graphene-based coatings".
- 2023-2025 Progetto PRIN 2022 BITEs4IoT "Biodegradable Thin film Electronics for massively deployable and sustainable Internet of Things applications" (Total Budget: 199,6 k€, Local 54 k€); local PI
- 2023-2024 Progetto Linea Strategica di Ateneo "HPC digital design of sustainable materials", UniMoRe (ha portato all'attribuzione di quattro posizioni, tra cui 2 RTT FIS/03 presso il FIM, 1 RTT MAT/08 presso il FIM e 1 PA CHIM/02 presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche); PI
- 2022-2026 Progetto Ecosistema dell'Innovazione "ECOSISTER - Ecological transition based on HPC and Data Technology", EU-MUR-PNRR, Spoke 6 "Ecological transition based on HPC & data technology" (Total Budget Regione ER: 112003 k€, Total Budget UniMoRe: 12966 k€; Local (Unimore@Spoke6): 2000 k€); co-PI. All'interno del progetto svolgo inoltre il ruolo di co-leader del WP1@Spoke6 "HPC materials design for clean energy applications".
- 2022-2024 EUMaster4HPC-EU Master in High Performance Computing, H2020-JTI-EuroHPC-2020-03 (Total Budget 7057 k€, Local 85,9 k€); Local co-PI.
- 2023-2026 MaX "Materials design at the exascale" HORIZON-EUROHPC-JU-2021-COE-01 (project 101093374)(Total Budget 8496 k€, Local 120 k€); Local co-PI per UniMoRe
- 2017 Progetto FAR Dipartimentale di Ateneo, "Ab initio simulation of optical vibrational spectroscopies in graphene nanoribbons" (Budget: 4652 €) ; PI
- 2014-2016 Progetto Linea Strategica di Ateneo, WP4, "Indagine teorica di nanostrutture innovative a base di ossidi metallici per applicazioni avanzate di raccolta dell'energia solare" (Budget: 24 mesi di Assegno di Ricerca); PI
- 2010 Progetto di collaborazione con l'Universita' di Sao Paulo nell'ambito del programma UniMoRe per la promozione della mobilita' degli scienziati (visita/soggiorno dello studente di dottorato L.M.M. Jorge); PI
- 2002-2006 Network Europeo "EXCITING" No. HPRN-CT-2002-00317 "First-Principles Approach to the Optical Properties of Solids", Fifth Framework Program (Total Budget: 1398 k€, Local Budget: 186 k€); co-PI del nodo di Modena
- 2002 Progetto bilaterale del Ministero Affari Esteri per la collaborazione scientifica con l'Universita' di Sao Paulo, Brasile, dal titolo "Proprietà ottiche ed elettroniche di materiali organici" (Budget: 33,2 k€); co-PI

Oltre ai progetti presentati e coordinati personalmente, ho partecipato alla formulazione, progettazione e realizzazione scientifica di progetti finanziati per > 10 MEuro. Gli ultimi progetti a cui ho partecipato sono:

- 2022-24 Progetto FAR "FLUID - FLuoride UltrathIn Dielectric films for 2D electronics", Progetto Nodo FAR Mission-Oriented, UniMoRe
- 2020-24 Progetto "Bat4ever - Autonomous Polymer based Self-Healing Components for high performant Lithium Ion Batteries", H2020-EU.1.2.- Future and Emerging Technologies

Sono stata inoltre responsabile scientifico di progetti *High Performance Computing*, in particolare ho coordinato 16 progetti CINECA, e partecipato a numerosi progetti HPC, tra Cineca e PRACE.

Di seguito la lista dei progetti di calcolo di cui sono stata PI.

- 2022-23 Progetto "SEE-NOW - SElf-healing Effects in silicon NanOWires", Cineca, ISCRA-C, Hosts:

- M100, Budget (standard hours): 30720 CPUh
- 2022 Progetto "MAN-BAT - organic functionalization can improve Mechanical properties of Anodes in Li-BATteries", Cineca, ISCRA-C, Hosts: M100, Budget (standard hours): 32000 CPUh, WORK Quote (in GB): 1024
- 2020-21 Progetto "FUSA - organic FUNCTIONalization of Si substrates in view of optimized battery Anodes", Cineca, ISCRA-C, Hosts: M100, Budget (standard hours): 29500 CPUh, WORK Quote (in GB): 1024
- 2018 Progetto "RAGNO - Raman features in Graphene NanORibbons: interpretation from ab-initio calculations", Cineca, ISCRA-C, Hosts: MARCON1, Budget (standard hours): 40000, WORK Quote (in GB): 1024, Additional Budgets: Selected Host: MARCON2 Host Budget: 3325 CPUh
- 2017-18 Progetto "VIGOR - Vibrational fingerprints in Graphene nanORibbons", Cineca, ISCRA-C, Hosts: MARCON1, Budget (standard hours): 35000, WORK Quote (in GB): 1024
- 2014-15 Progetto "GRANA - Optical properties of experimentally feasible GRAPhene NANoribbons", Cineca, ISCRA-B, Selected Host: FERMI, Host Budget: 1520000 CPUh
- 2013-14 Progetto "OPLA - OPTical Limit in orgANic molecules", Cineca, ISCRA-B, Selected Host: EURORA, Host Budget: 100000 CPUh
- 2011-13 Progetto "DOOR - Designing Optoelectronic properties of pOlymer cRystals", Cineca, ISCRA-B, Selected Host: FERMI, Host Budget: 115000 CPUh
- 2010-11 Progetto "PHOTON - oPtoelectronic beHAVIOR Of TiO2 Nanoparticles upon organic functionalization", Cineca, ISCRA-B, Selected Host: SP6, Host Budget: 65000 CPUh
- 2008-09 Progetto di Supercalcolo "First-Principles Simulation of Near-Field Optical Spectra in Organic Polymers", Cineca, 45000 CPUh
- 2007 Progetto di Supercalcolo "Excitons in graphene nanoribbons and nanotubes", Cineca, 40000 CPUh
- 2006 Progetto di Supercalcolo "Kinetics for the formation of organic layers on hydrogenated silicon surfaces", Cineca, 25000 CPUh
- 2006 Progetto di Supercalcolo "Ab initio investigation of luminescence properties in organic semiconductors and amorphous systems", Cineca, 25000 CPUh
- 2006 Progetto di Supercalcolo "Structural and transport properties of organic crystals", Cineca, 12000 CPUh
- 2005 Progetto di Supercalcolo "Optoelectronic properties of organic molecular crystals", Cineca, 32500 CPUh
- 2005 Progetto di Supercalcolo "Thermodynamics and kinetics of organic molecules on hydrogenated silicon surfaces", Cineca, 37500 CPUh

5.4 Partecipazione a comitati scientifici e membership

- 2024 Membro dell'Electrochemical Society (ECS)
- 2023 Membro del Comitato Scientifico dei WP Leaders del progetto ASGARD
- 2022 Membro del Comitato Scientifico dei WP Leaders di Spoke 7 del Centro Nazionale HPC, Big Data and Quantum Computing, in quanto co-leader di WP4 "Pilot applications"
- 2020 Membro del Comitato Scientifico della Fondazione 'Angelo Della Riccia'

5.5 Principali argomenti di ricerca e risultati scientifici ottenuti

Nel seguito vengono brevemente descritti alcuni filoni di ricerca rilevanti - definiti soprattutto in termini dei sistemi studiati - e una selezione di alcuni risultati significativi che sono stati ottenuti corrisponden-

temente.

POLIMERI ORGANICI

Questa linea di ricerca ha portato alla concettualizzazione delle proprietà ottiche e di trasporto elettronico di polimeri semiconduttori, con particolare riferimento all'effetto del *packing* tra le catene che si verifica nei solidi polimerici. A questo proposito, è stato dimostrato che le interazioni inter-catena hanno un effetto cruciale: possono introdurre la presenza di eccitoni *dark* nello spettro di assorbimento ottico e favorire sensibilmente il trasporto nella direzione ortogonale alle catene, che può diventare molto efficiente. Per descrivere quest'ultimo meccanismo con schemi da principi primi, si è sviluppato e implementato il calcolo dei *transfer integrals*, mentre le proprietà ottiche sono state studiate introducendo nel codice l'interazione elettrone-buca, assolutamente cruciale in sistemi a bassa dimensionalità.

Pubblicazioni selezionate

- *Solid state effects on exciton states and optical properties of PPV*, Phys. Rev. Lett. 88, 206403 (2002)
- *Interchain interaction and Davydov splitting in polythiophene crystals: an ab initio approach*, Appl. Phys. Lett. 80, 4118 (2002)
- *Transport properties in polymer crystals: the effect of interchain interaction*, Phys. Rev. Lett. 90, 086401 (2003)
- *Ab initio study of transport parameters in polymer crystals* Phys. Rev. B 69, 205205 (2004)
- *Fluorine-Induced Enhancement of the Oxidation Stability and Deep-Blue Optical Activity in Conductive Polyfluorene Derivatives*, Journal of Physical Chemistry C 117, 26760 (2013)

NANOTUBI DI CARBONIO

Per studiare in modo efficiente le proprietà optoelettroniche dei nanotubi con metodi sofisticati (e costosi) *beyond-DFT*, abbiamo sviluppato uno schema specificamente disegnato per sistemi con simmetria elicoidale, che sfrutta infatti un set di funzioni di base localizzate e simmetrizzate (al posto delle onde piane). Questo approccio ci ha permesso di predire le proprietà eccitoniche di nanotubi, sia in regime lineare che non-lineare e di razionalizzare i risultati di esperimenti di fotoluminescenza sia *one* che *two-photon*.

Pubblicazioni selezionate

- *Excitons in carbon nanotubes: an ab initio symmetry-based approach* Phys. Rev. Lett. 92, 196401 (2004)
- *First-principles approach for the calculation of optical properties of one-dimensional systems with helical symmetry: The case of carbon nanotubes* Phys. Rev. B 72, 195423 (2005)
- *Exciton binding energies in carbon nanotubes from two-photon photoluminescence* Phys. Rev. B (R) 72, 241402 (2005)

NANOSTRUTTURE DI GRAFENE

Lo studio delle nanostrutture basate sul grafene, in particolare i *nanoribbons* e i *nanoflakes* di grafene, ha rappresentato un filone di ricerca particolarmente fecondo di risultati interessanti, sia dal punto di vista concettuale e predittivo che dal punto di vista della razionalizzazione di risultati sperimentali. Numerose sono infatti le pubblicazioni congiunte teorico-sperimentali che hanno seguito (e convalidato) i primi lavori prettamente teorici: esempio fra tutti il lavoro che ha previsto e quantificato il fatto che la risposta ottica sia dominata da eccitoni (PRB-RC-2018), poi confermato (NATCOMM-2014). Le nanostrutture di grafene sono sistemi molto stimolanti: per essi abbiamo dimostrato vari meccanismi che permettono di regolare le proprietà elettroniche ed ottiche, come le distorsioni strutturali o la funzionalizzazione e geometria degli *edge*.

Pubblicazioni selezionate

- *Optical properties of graphene nanoribbons: The role of many-body effects*, Phys. Rev. B 77, 041404(R) (2008)
- *Quantum dot states and optical excitations of edge-modulated graphene nanoribbons*, Phys. Rev. B 84, 041401(R) (2011)
- *Designing All-Graphene Nanojunctions by Covalent Functionalization*, Journal of Physical Chemistry C 115, 2969 (2011)
- *Optical Excitations and Field Enhancement in Short Graphene Nanoribbons*, Journal of Physical Chemistry Lett. 3, 924 (2012)
- *Exciton-dominated optical response of ultra-narrow graphene nanoribbons*, Nature Communications 5, 4253 (2014)
- *Raman Fingerprints of Atomically Precise Graphene Nanoribbons* Nano Letters 16, 3442 (2016)
- *Bandgap Engineering of Graphene Nanoribbons by Control over Structural Distortion* J. Am. Chem. Soc 140, 7803 (2018)

SISTEMI IBRIDI

Una strategia efficace per disegnare materiali con proprietà desiderate consiste nella funzionalizzazione organica tramite adsorbimento di ligandi opportuni. Ciò permette di controllare la distribuzione degli stati nel gap, di regolare potenziale di ionizzazione/affinità elettronica, di disegnare *ad hoc* allineamenti di banda all'interfaccia a partire dalla identificazione dei meccanismi fondamentali che li regolano. La pittura che abbiamo estratto dai nostri risultati fornisce strategie efficaci in vista di applicazioni (ad esempio in ambito fotovoltaico, batterie, fotorivelatori e chemical sensing).

Pubblicazioni selezionate

- *Mixing of electronic states in pentacene adsorption on copper*, Phys. Rev. Lett. 99, 046802 (2007)
- *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)
- *A first-principles study of self-healing binders for next-generation Si-based lithium-ion batteries*, Materials Today Chemistry 29, 101474 (2023)

OSSIDI

Gli ossidi costituiscono una classe di materiali molto versatili, che coprono praticamente l'intero spettro di funzionalità: da dielettrici a semiconduttori, da metallici a superconduttori. Gli aspetti di cui mi sono principalmente occupata in questo ambito hanno riguardato (i) gli effetti di disordine e difetti sulle proprietà elettroniche di un ossido prototipo, SiO₂, un dielettrico di grande interesse applicativo, e (ii) lo studio dell'origine delle proprietà ottiche e plasmoniche di ossidi trasparenti conduttivi (in particolare Al-doped ZnO, un materiale low-cost, facilmente processabile e indium-free), analizzando anche l'impatto dovuto alla presenza di difetti; tale comprensione risulta strategica in vista di applicazioni in ambito di optoelettronica, spintronica e telecomunicazioni.

Pubblicazioni selezionate

- *Unraveling effects of disorder on the electronic structure of SiO₂ from first-principles*, Phys. Rev. B 81, 081202(R) (2009)
- *Transparent Conductive Oxides as Near-IR Plasmonic Materials: The Case of Al-Doped ZnO Derivatives*, ACS Photonics 1, 703 (2014)
- *Optoelectronic properties and color chemistry of native point defects in Al:ZnO transparent conductive oxide*, Journal of Materials Chemistry C 3, 8419 (2015)
- *Magnetic Transparent Conductors for Spintronic Applications*, arXiv:2312.13708, resubmitted to Advanced Physics Research (2024)

SVILUPPO, IMPLEMENTAZIONE E BENCHMARK DI SCHEMI TEORICO/COMPUTAZIONALI AVANZATI

Oltre all'interesse per la comprensione/predizione delle proprietà *per se* dei sistemi fisici, ci siamo notevolmente dedicati allo sviluppo metodologico di schemi teorici avanzati per lo studio di tali proprietà. Tra questi, si menzionano qui l'implementazione e validazione di *self-energies beyond GW* per lo studio delle eccitazioni elettroniche, la progettazione di Hamiltoniane tight-binding a partire da schemi ab initio per lo studio delle spettroscopie (anche sfruttando considerazioni basate sulle simmetrie o utilizzando metodologie high-throughput), e lo sviluppo di schemi basati su TDDFT per problemi di ottica non-lineare (v. optical limiting).

Pubblicazioni selezionate

- *Ab initio complex band structure of conjugated polymers: Effects of hybrid density functional theory and GW schemes*, Phys. Rev. B 85, 235105 (2012)
- *Ab Initio Simulation of Optical Limiting: The Case of Metal-Free Phthalocyanine*, Phys. Rev. Lett. 112, 198303 (2014)
- *Accurate ab initio tight-binding Hamiltonians: Effective tools for electronic transport and optical spectroscopy from first principles*, Phys. Rev. B 94, 165166 (2016)
- *Nonlinear light absorption in many-electron systems excited by an instantaneous electric field: a non-perturbative approach*, Phys. Chem. Chem. Phys. 23, 10059 (2021)
- *Effect of uniaxial strain on the excitonic properties of monolayer: A symmetry-based analysis*, Physical Review B 107, 045430 (2023)
- *Numerically precise benchmark of many-body self-energies on spherical atoms*, Journal of Chemical Theory and Computation 18, 3703 (2022)

6 ALTRE ATTIVITÀ ISTITUZIONALI E PROFESSIONALI

6.1 Coordinamento o partecipazione ad organi di governo

- 2005 - oggi Membro del Collegio dei Docenti della Scuola di Dottorato in Fisica e Nanoscienze, UniMoRe
- 2018 - oggi Presidente della Commissione Ricerca del Dipartimento FIM, UniMoRe (precedentemente componente della medesima Commissione dal 2015)
- 2018 - oggi Membro della Giunta del Dipartimento FIM UniMoRe
- 2022 - oggi Membro della Fondazione ICSC, Centro Nazionale HPC, Big Data and Quantum Computing (PNRR), in rappresentanza dell'Ateneo (tramite delega permanente dal Rettore UniMoRe)
- 2022 - oggi Membro del Comitato degli Spoke Leaders di ECOSISTER - Ecosistema Territoriale di Innovazione dell'Emilia-Romagna (PNRR)
- 2023 - oggi Membro della Commissione Qualità del Dipartimento FIM, UniMoRe

6.2 Comunicazione e divulgazione scientifica

Alla attività di ricerca e didattica ho affiancato una attività di **comunicazione e divulgazione della scienza** indirizzata principalmente a studenti e insegnanti di scuola superiore.

- 2024 Seminario "Grafene: il materiale delle meraviglie", rivolto alle classi IV e V del Liceo Scientifico A. Tassoni, nell'ambito della Giornata Seminari Tematici organizzata dalla Scuola
- 2017,2019-24 Seminari e attività di laboratorio "Simulare i materiali con il computer", rivolti agli studenti delle classi quarte delle Scuole superiori di Modena e Reggio Emilia, nell'ambito delle iniziative "Una Settimana da Scienziato" e "A tu per tu con la Scienza" (settimane invernali e settimane estive), c/o Dipartimento FIM UniMoRe
- 2016 Seminario dal titolo "Il grafene delle meraviglie", organizzato dalla Società dei Naturalisti e Matematici di Modena, c/o Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, UniMoRe

- 2015 Seminario “Simulare la materia con i computer” rivolto principalmente ai docenti e agli studenti delle classi quinte delle Scuole superiori di Modena e Reggio Emilia nell’ambito dell’iniziativa Physiscs Class, c/o Dipartimento FIM, UniMoRe
- 2011 Seminario “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, UniMoRe
- 2010-11 Seminari ed esercitazioni “Laboratorio Computazionale” per gli studenti delle scuole superiori nell’ambito del college FareFisica presso il Dipartimento di Fisica dell’Università di Modena e Reggio Emilia
- 2007 Seminario dal titolo “Fisica e ricerca: costruire modelli e simulare la materia” per studenti e docenti della scuola superiore 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, UniMoRe
- 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 *Dagli atomi alle biomolecole - Linus Pauling due volte Nobel tra scienze e impegno civile*, 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.

6.3 Organizzazione di conferenze e workshop

- 2023 Organizzatore del Kick-off Meeting di WP1@Spoke6 di ECOSISTER, Modena
- 2015 Organizzazione del Workshop “Fisica@Modena” (18 dicembre) c/o Dipartimento FIM, UniMoRe, finanziato di Fondazione Cassa di Risparmio di Modena
- 2005 Organizzazione della “topical session” su “Nanotubes and nanowires: electronics and optics”, Matter, Materials and Devices (MMD) Meeting 2005, Genova.

6.4 Attività editoriali

- Membro del panel di Review Editor for the Condensed-Matter Section of the journal “Frontiers in Physics”, dal 2014 a oggi
- Attività di Referee per numerose riviste scientifiche (e.g. Physical Review Letters, Physical Review B, RCS Advances. Nanotechnology, Journal of Chemical Physics, Chemical Physics, ...)

6.5 Attività di valutazione della ricerca

Progetti di ricerca

- Componente dell’albo di esperti scientifici del MUR (REPRISE)
- Revisore per la valutazione dei prodotti di ricerca nell’ambito della VQR 2011-2014 e VQR 2015-2019
- Valutatore di progetti scientifici (ERC-Starting, 2021; University of Nova Gorica, 2013) e di supercalcolo (>10 progetti IS CRA-CINECA).

Dottorato di ricerca

- 2024 Membro del *Jury* di tesi per il conseguimento del PhD di Alam T. Osorio Delgadillo, Doctoral School, Ecole Doctorale de l'Institut Polytechnique de Paris
- 2023 Membro della commissione per l'esame finale di Dottorato in Fisica, Università di Lecce
- 2016 Membro della commissione giudicatrice per il conferimento del titolo di "Dottore di Ricerca" in "Physics and nano sciences", nell'ambito della Scuola di Dottorato in "Physics and nano sciences" (XXVII e XXVIII ciclo), UniMoRe
- 2013 Membro di Commissione per esami finali di PhD in Fisica, Università di Cagliari
- 2004 Membro di Commissione per esami finali di PhD in Physics, Université de Cergy-Pontoise, Paris

6.6 Commissioni di selezione

Membro o presidente di commissioni di selezione o valutazione di personale scientifico in ambito accademico o di enti di ricerca. Ho fatto parte di numerose (>15) commissioni per il conferimento di Assegni di Ricerca; nel seguito vengono dettagliate le partecipazioni a commissioni di selezione di Dottorato e di personale ricercatore:

PhD:

- 2022: Membro della commissione giudicatrice per l'ammissione al Corso di Dottorato di Ricerca in "Physics and nano sciences", XXXVIII ciclo – (Bando del 19/10/2022 per posti con borsa con tematica specifica)
- 2021: Membro della commissione giudicatrice per l'ammissione al Corso di Dottorato di Ricerca in "Physics and nano sciences", XXXVII ciclo
- 2020: Membro della commissione giudicatrice per l'ammissione al Corso di Dottorato di Ricerca in "Physics and nano sciences", XXXVI ciclo
- 2017: Membro della commissione giudicatrice per l'ammissione al Corso di Dottorato di Ricerca in "Physics and nano sciences", XXXIII ciclo.
- 2015: Membro della commissione giudicatrice per l'ammissione al Corso di Dottorato di Ricerca in "Physics and nano sciences", XXXI ciclo

Rtd e RTT (SC 02/B2, SSD FIS/03)

- 2023 Membro della commissione commissione giudicatrice nell'ambito della procedura selettiva per ricercatore a tempo determinato in tenure-track (RTT), Dipartimento FIM, UniMoRe.
- 2023 Membro della commissione giudicatrice per la procedura per ricercatore a tempo determinato, ex art.24, comma 3, lettera b) della L.240/2010, presso l'Area Fisica della SISSA, Trieste.
- 2023 Membro della commissione giudicatrice nell'ambito della selezione pubblica per ricercatore a tempo determinato di tipo A presso il Dipartimento di Fisica "Aldo Pontremoli" dell'Università di Milano.
- 2023 Membro della commissione giudicatrice nell'ambito della procedura selettiva per ricercatore a tempo determinato tipo B presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Parma.
- 2022 Membro della commissione giudicatrice nell'ambito della procedura selettiva per ricercatore a tempo determinato di tipo A, Dipartimento FIM, UniMoRe.

2019 Membro della commissione commissione giudicatrice nell'ambito della procedura selettiva per ricercatore a tempo determinato di tipo A, Dipartimento di Fisica dell'Università di Parma.

6.7 Abilitazioni

- Abilitazione Scientifica Nazionale a ricoprire la posizione di professore di I fascia, Settore Concorsuale 02/B2 - Fisica teorica della materia. L'abilitazione è stata ottenuta nella sessione ASN 2016-2018, con periodo di validità: 08/08/2018 - 08/08/2029.
- Abilitazione Scientifica Nazionale a ricoprire la posizione di professore di II fascia, Settore Concorsuale 02/B2 - Fisica teorica della materia. L'abilitazione è stata ottenuta nella sessione ASN 2013, con periodo di validità: 07/10/2014 - 07/10/2025.

Ho inoltre conseguito l'abilitazione all'Insegnamento Secondario, 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).

La sottoscritta Alice Ruini dichiara che, al meglio delle proprie conoscenze, tutte le informazioni riportate nel presente Curriculum Vitæ corrispondono al vero;

Modena, 10 giugno 2025

Alice Ruini

La sottoscritta Alice Ruini autorizza al trattamento dei propri dati personali, ai sensi del D.lgs. 196 del 30 giugno 2003.

Modena, 10 giugno 2025

Alice Ruini

A Elenco completo delle pubblicazioni

A.1 Articoli su riviste internazionali

1. 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)
2. A. Ruini, R. Resta, and S. Baroni
Effects of interface morphology on Schottky-barrier heights: A case study on Al/GaAs(001)
Phys. Rev. B **56**, 14921 (1997)
3. A. Ruini, R. Resta, and S. Baroni
Dynamical-charge neutrality at a crystal surface
Phys. Rev. B **57**, 5742 (1998)
4. 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**, 2567 (2001)
5. A. Ruini, M. J. Caldas, G. Bussi, and E. Molinari
Solid state effects on exciton states and optical properties of PPV
Phys. Rev. Lett. **88**, 206403 (2002)
6. 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
Appl. Phys. Lett. **80**, 4118 (2002)
7. 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)
8. 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)
9. A. Ferretti, A. Ruini, M. J. Caldas, and E. Molinari
Transport properties in polymer crystals: the effect of interchain interaction
Phys. Rev. Lett. **90**, 086401 (2003)
10. 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)
11. E. Chang, G. Bussi, A. Ruini, and E. Molinari
Excitons in carbon nanotubes: an ab initio symmetry-based approach
Phys. Rev. Lett. **92**, 196401 (2004)
12. 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)
13. A. Ferretti, A. Ruini, G. Bussi, E. Molinari, M. J. Caldas
Ab initio study of transport parameters in polymer crystals
Phys. Rev. B **69**, 205205 (2004)
14. A. Ruini
Ab initio optical absorption in conjugated polymers: the role of dimensionality
Physica Scripta **T109**, 121 (2004)
15. C. S. Cucinotta, A. Ruini, A. Catellani, M. J. Caldas
Tailoring the electronic properties of silicon with cysteine: A first-principles study

- Phys. Rev. B* **72**, 245310 (2005)
16. 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
Phys. Rev. B **72**, 195423 (2005)
 17. 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
Phys. Rev. B (R) **72**, 241402 (2005)
 18. 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**, 1754 (2005)
 19. 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)
 20. 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)
 21. A. Calzolari, A. Ruini, M. J. Caldas, and E. Molinari
Surface nano-patterning through styrene adsorption on Si(100)
Phys. Rev. B **73**, 125420 (2006)
 22. 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)
 23. 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)
 24. 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)
 25. 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
Phys. Rev. Lett. **99**, 046802 (2007)
 26. 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)
 27. 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
Phys. Rev. B **77**, 245430 (2007)
 28. D. Prezzi, D. Varsano, A. Ruini, A. Marini, and E. Molinari
Optical properties of graphene nanoribbons: The role of many-body effects

- Phys. Rev. B (R)* **77**, 041404(R) (2008)
29. 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)
 30. 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)
 31. L. Zoppi, A. Calzolari, A. Ruini, A. Ferretti, M. J. Caldas
Defect-induced effects on carrier migration through one-dimensional poly(para-phenylenevinylene) chains
Phys. Rev. B **78**, 165204 (2008)
 32. 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)
 33. 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
Phys. Rev. B **81**, 081202(R) (2009)
 34. A. Calzolari, S. Monti, A. Ruini, A. Catellani
Hydration of cyanin dyes
Journal of Chemical Physics **132**, 114304 (2010)
 35. 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)
 36. 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)
 37. 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)
 38. 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)
 39. C. Cocchi, D. Prezzi, A. Ruini, M. J. Caldas, and E. Molinari
Optical Properties and Charge-Transfer Excitations in Edge-Functionalized All-Graphene Nanojunctions
Journal of Physical Chemistry Lett. **2**, 1315 (2011)
 40. D. Prezzi, D. Varsano, A. Ruini, and E. Molinari
Quantum dot states and optical excitations of edge-modulated graphene nanoribbons
Phys. Rev. B **84**, 041401(R) (2011)
 41. 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 Lett. **3**, 924 (2012)
 42. 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

- Phys. Rev. B* **85**, 235105 (2012)
43. A. Calzolari, A. Ruini, A. Catellani
Surface Effects on Catechol/Semiconductor Interfaces
Journal of Physical Chemistry C **116**, 17158 (2012)
 44. 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)
 45. 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)
 46. 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 (2012)
 47. 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)
 48. 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 **240**, 2106 (2013)
 49. 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)
 50. A. Catellani, A. Calzolari, A. Ruini
Effect of ultrathin gold on the Ohmic-to-Schottky transition in Al/ZnO contacts: A first-principles investigation
Journal of Appl. Phys. **115**, 043711 (2014)
 51. 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)
 52. C. Cocchi, D. Prezzi, A. Ruini, E. Molinari, C. A. Rozzi
Ab Initio Simulation of Optical Limiting: The Case of Metal-Free Phthalocyanine
Phys. Rev. Lett. **112**, 198303 (2014)
 53. 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)
 54. 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)
 55. 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)
 56. 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)
57. A. Catellani, A. Ruini, M. B. Nardelli, A. Calzolari
Unconventional co-existence of plasmon and thermoelectric activity in In:ZnO nanowires
RCS Advances **5**, 44865 (2015)
58. 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)
59. 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)
60. 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
Phys. Rev. B **94**, 165166 (2016)
61. 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. Ferrett
Probing optical excitations in chevron-like armchair graphene nanoribbons
Nanoscale **9**, 18326 (2017)
62. 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)
63. 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)
64. 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 (2017)
65. 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 (2018)
66. 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 (2018)
67. 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 (2018)

68. 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**, 5021 (2019)
69. 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 (2020)
70. 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 (2021)
71. 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)
72. 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 (2021)
73. 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)
74. 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 (2022)
75. M. Zanfrognini, N. Spallanzani, M. Bonacci, E. Molinari, A. Ruini, M.J. Caldas, A. Ferretti, D. Varsano,
Effect of uniaxial strain on the excitonic properties of monolayer: A symmetry-based analysis
Physical Review B **107**, 045430 (2023)
76. R. Maji, M. A. Salvador, A. Ruini, R. Magri, E. Degoli
A first-principles study of self-healing binders for next-generation Si-based lithium-ion batteries
Materials Today Chemistry **29**, 101474 (2023)
77. M. A. Salvador, R. Maji, F. Rossella, E. Degoli, A. Ruini, R. Magri
Structural and Dynamic Characterization of Li-Ionic Liquid Electrolyte Solutions for Application in Li-Ion Batteries: A meet.google.com/hxz-jjra-gcoMolecular Dynamics Approac
Batteries **9**, 234 (2023)
78. 1. M. Zanfrognini, M. Bonacci, F. Paleari, E. Molinari, A. Ruini, A. Ferretti, M. J. Caldas, D. Varsano
Quenching of low-energy optical absorption in bilayer polytypes
Phys. Rev. Mater. **7**, 064006 (2023)
79. L Peri, D Prete, V Demontis, E Degoli, A Ruini, R Magri, F Rossella
Measuring thermal conductivity of nanostructures with the 3 ω method: the need for finite element modeling
Nanotechnology **34**, 435403 (2023)
80. M. Borghi, A. Mescola, G. Paolicelli, M. Montecchi, S. D'Addato, S. Vacondio, L. Bursi, A. Ruini,

- B. P. Doyle, T. Grasser, L. Pasquali
Initial stages of growth and electronic properties of epitaxial SrF₂ thin films on Ag(111)
Appl. Surf. Sci. **656**, 159724 (2024)
81. S. Vacondio, D. Varsano, A. Ruini, and A. Ferretti
Going beyond the GW approximation using the time-dependent Hartree-Fock vertex *Journal of Chemical Theory and Computation* **20**, 4718–4737 (2024)
82. R. Maji, M. A. Salvador, A. Ruini, R. Magri, E. Degoli
Insights into the Stability and Reactivity of Lithiated Si-binder Interfaces for Next Generation Lithium-Ion Batteries *Sustainable Materials and Technologies* **610**, 234705 (2024)
83. P. D'Amico, A. Catellani, A. Ruini, S. Curtarolo, M. Fornari, M. Buongiorno Nardelli and A. Calzolari
Magnetic Transparent Conductors for Spintronic Applications *Acta Materialia* **289**, 120850 (2025)
84. M. A. Salvador, R. Maji, E. Degoli, A. Ruini, R. Magri,
Unveiling the molecular structures and interactions in boronic acid functionalized aniline oligomers for application in self-healing battery electrodes, accepted in *Journal of Polymer Science*, (2025)

A.2 Contributi su monografie

1. 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., curatori, pag. 181 (Plenum Press, New York, (1995), Codice isbn: [9780306449994].
2. A. Ruini, M. J. Caldas, G. Bussi, A. Ferretti, B. M. Silva, G. Goldoni, E. Molinari
Optical properties of organic materials: from single molecules to solid state
in *Radiation-Matter interaction in confined systems*, L. C. Andreani, G. Benedek, E. Molinari, curatori, pag. 155-173 (S.I.F., Bologna, (2002)), Codice isbn: [9788874380046].

A.3 Proceeding di conferenze

1. A. Ruini, F. Rossi, E. Molinari, R. B. Capaz, M. J. Caldas
Coulomb-correlated optical properties of semiconductor conjugated polymers
ICPS-24 Proceedings, World Scientific Publishing, Singapore, (1998)
2. 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)
3. 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)
4. 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)

B Principali comunicazioni a congressi

B.1 Comunicazioni ad invito

1. "First-principles study of Coulomb-correlated optical properties in conjugated polymers", Convegno Nazionale Materiali Molecolari Avanzati per Fotonica ed Elettronica, Villasimius (CA), Italia (1999)
2. "Optical Properties of Semiconducting Conjugated Polymers: a First-Principles Study", CECAM Workshop on "Excited States and Electronic Spectra", Lione, Francia (2000)
3. "First-principles study of Coulomb-correlated optical properties in conjugated polymers", XI Workshop on Computational Material Science (CSM), Villasimius (CA), Italia (2001)
4. "Excitonic states in conjugated polymers and oligomers", First European Meeting of EU Research and Training Network "Exciting", Graz, Austria (2002)
5. "Ab initio optical absorption in conjugated polymers: the role of dimensionality", Summer School of EU Research and Training Network "Exciting", Riksgränsen, Svezia (2003)
6. "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)
7. "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)
8. "Illuminating graphene nanostructures", E-MRS 2012 Fall Meeting, Warsaw, Poland (2012)
9. "Exploiting Coupling, Width Modulation and Edge Functionalization in Graphene Nanostructures", E-MRS 2013 Spring Meeting, Strasbourg, France (2013)
10. "Effects of aggregation, defects and functionalization in conjugated carbon-based nanostructures", E-MRS 2014 Spring Meeting, Lille, France (2014)
11. "Theoretical spectroscopy of graphene nanoribbons", 107° Congresso Nazionale SIF (2021)
12. "Ab initio computational spectroscopy applied to graphene nanoribbons", Conference 'Photoemission Tomography: Applications and Future Developments', Bad Honnef, Germany (2021)
13. "Computational Design of Low-D Graphene-Based Systems in View of Energy Applications", 245th Meeting of the ElectroChemical Society (ECS), San Francisco, US (May 26-30, 2024)

B.2 Principali comunicazioni orali (*contributed*)

1. A. Ruini, P. Casarini, and C. Jacoboni, "Dynamics of electrons in a 2D region coming from a point-contact", presentazione orale al Convegno annuale del GNSM-INFM, Abano Terme (PD), Italia (1994)
2. A. Ruini, R. Resta, and S. Baroni, "Ab-initio study of the Schottky Barrier problem for Al/GaAs junctions", presentazione orale al 20th Annual Meeting on Advances in Surface and Interface Physics, Modena, Italia (1995)

3. A. Ruini, R. Resta, and S. Baroni, "Acoustic sum rule at a crystal surface", presentazione orale all' American Physical Society March Meeting, Kansas City, Missouri, USA (1997)
4. A. Ruini, R. Resta, and S. Baroni, "Effects of interface morphology on the Schottky barrier height", presentazione orale all' American Physical Society March Meeting, Kansas City, Missouri, USA (1997)
5. A. Ruini, R. Resta, and S. Baroni, "Dynamical charges at surfaces and interfaces: their role in the Schottky barrier problem", presentazione orale al VII Italian-Swiss Workshop on Computational Condensed Materials Science, S. Margherita di Pula (CA), Italia (1997)
6. A. Ruini, R. Resta, and S. Baroni, "Coverage dependence of gap states at metal/semiconductor interfaces", presentazione orale al Tunable Schottky Barrier Meeting, Trieste, Italia (1999)
7. A. Ruini, F. Rossi, E. Molinari, R.B. Capaz and M. J. Caldas, "Coulomb-correlated optical ab-initio calculation of optical absorption spectra in semiconducting conjugated polymers", presentazione orale al III Congresso Nazionale di Fisica della Materia (INFMeeting), Genova, Italia (2000)
8. A. Ruini, G. Bussi, A. Ferretti, M. J. Caldas, and E. Molinari, "First-principles analysis of optical and electronic properties in semiconducting polymers: the role of solid-state packing" presentazione orale alla Fifth International Topical Conference on Optical Probes of Conjugated Polymers and Organic and Inorganic Nanostructures, Venezia, Italia (2003)
9. A. Ruini, G. Bussi, A. Ferretti, E. Molinari, and M. J. Caldas, "Effect of chain packing on the optical and transport properties of crystalline organic semiconductors: an ab initio investigation", presentazione orale al E-MRS 2003 Spring Meeting, Strasbourg, Francia (2003)
10. A. Ruini, C. Cucinotta, E. Molinari, and M. J. Caldas, "Ab initio Study of Chemisorption Reactions of Carboxylic Acids on Hydrogenated Silicon Surfaces", presentazione orale al Convegno Nazionale per la Ricerca Interdisciplinare in Fisica della Materia INFMeeting, Genova, Italia (2004)
11. A. Ruini, C. Cucinotta, E. Molinari, and M. J. Caldas, "Chemisorption of saturated and unsaturated carboxylic acids on silicon: a first-principles comparison among competing functionalization mechanisms", MMD Meeting 2005, Genova, Italia (2005)
12. A. Ruini, D. Prezzi, E. Chang, G. Bussi, D. Varsano, A. Marini and E. Molinari, "Ab-initio many-body effects on the optoelectronic properties of 1D nanostructures: carbon nanotubes and graphene nanoribbons", Computational Challenges in Carbon Nanotubes (CCNT08), Montpellier, Francia (2008)
13. A. Ruini, D. Prezzi, C. Cocchi, A. Candini, M. Affronte, E. Molinari, "Graphene-based nanostructures: recent theoretical and experimental advances in Modena", Graphene workshop, CNR-IMM, Bologna, Italia (2010)
14. A. Ruini, A. Calzolari, M.J. Caldas, E. Molinari, "Effects of solid-state packing and oxygen defects on the electronic and optical properties of PPV by means of ab-initio calculations", CECAM Workshop on First Principles Theory and Modeling in Organic Electronics, Lausanne, Switzerland (2001)
15. A. Ruini, A. Calzolari, M.J. Caldas, "Effects of solid-state packing and oxygen defects on the electronic and optical properties of PPV", Workshop on Photovoltaics: New Frontiers and Applications, CNR-NNL, Lecce, Italia (2011)

16. A. Ruini, A. Calzolari, A. Catellani, "Ab Initio Study of ZnO-based Hybrid Interfaces for Photovoltaic Applications", SINFO Conference (Surfaces, Interfaces and Functional processes in Organic compounds and applications) Parma, Italia (2012)
17. A. Ruini, S. Wang, D. Prezzi, A. Ferretti, D. Varsano and E. Molinari, "Exploiting Coupling, Width Modulation and Edge Functionalization in Graphene Nanostructures", EMRS Strasbourg, France (2013)
18. A. Ruini, A. Calzolari, A. Catellani, "Transparent Conductive Oxides as Near-IR Plasmonic Materials: The Case of Al-Doped ZnO Derivatives", CECAM Workshop 'Computational plasmonics: an ab initio and multiscale perspective', CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland (2015)
19. A. Ruini, D. Prezzi, A. Ferretti, D. Varsano and E. Molinari, "Electron and Optical Spectroscopies of Graphene Nanoribbons on Au(111)", Workshop GRAPHITA 2015 - A Multidisciplinary and Intersectorial Workshop on Synthesis, Characterization and Technological Exploitation of Graphene, Bologna, Italia (2015)
20. A. Ruini (in collaborazione con il team ECOSISTER) "Computational materials design: a route to support the ecological transition", Salone Internazionale della Ricerca e delle Alte Competenze "Research2Business" (R2B), Bologna, Italia (2024)