

# **CURRICULUM VITAE ET STUDIORUM**

**Prof. Mauro Stener**

## **INFORMAZIONI PERSONALI**

Data e luogo di nascita: 13 giugno 1967, Trieste, Italia.

Cittadinanza italiana

Indirizzo di lavoro: Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università degli studi di Trieste, via Giorgieri 1, 34127 Trieste.

Tel: +39 0405583949

Fax: +39 0405583903

email: stener@units.it

ORCID: 0000-0003-3700-7903

ResearcherID: B-7987-2014

## **STUDI E FORMAZIONE**

Il Prof. Mauro Stener, nato a Trieste il 13 giugno 1967, si è laureato in Chimica il 13 marzo 1992 presso l'Università di Trieste con il punteggio di 110/110 e lode discutendo una tesi in chimica-fisica dal titolo: "Analisi teorica e sperimentale dell'omopolimerizzazione in emulsione" (relatore: Prof. N. Rahman). Nel dicembre 1992 è risultato vincitore della borsa di studio per il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche (VIII Ciclo) con sede amministrativa Trieste, ed ha quindi iniziato a svolgere l'attività di ricerca nell'area Chimica Teorica (relatore: Prof. P. Decleva). La tematica di ricerca sviluppata nel corso del dottorato consiste nell'applicazione della teoria del funzionale densità a stati elettronici eccitati di atomi e molecole. Il Prof. Stener ha regolarmente terminato il periodo di frequenza del Dottorato di Ricerca il 31 ottobre 1995 ed in data 31 ottobre 1996 ha superato l'esame finale per il conseguimento del Titolo di Dottore di Ricerca.

## **ESPERIENZE PROFESSIONALI**

Dal 1 novembre 1995 il Prof. Stener ha fruito di una borsa di studio annuale di post-dottorato (scadenza 31 ottobre 1996) nell'ambito del programma "Human Capital Mobility" dell'Unione Europea (contratto EU Projekt ERB-CHRX-CT 94-0532) presso l'istituzione estera denominata: "Lehrstuhl für Theoretische Chemie - Technischen Universität München" (Cattedra di Chimica Teorica dell'Università Tecnica di Monaco - Germania), titolare della cattedra: Prof. Dr. Notker Rösch. In questa sede estera il Prof. Stener ha svolto un'attività di ricerca di chimica teorica basata sulla teoria del funzionale densità relativistico con applicazioni a cluster metallici. A decorrere dal 6 aprile 1998, il Prof. Stener è stato nominato ricercatore universitario per il settore scientifico-disciplinare C02X - Chimica fisica presso la Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali dell'Università di Trieste, in quanto vincitore di concorso. Nell'anno 2001 il Prof. Stener è stato confermato in ruolo come Ricercatore Confermato.

Nell'anno 2006 il Prof. Stener ha conseguito l'idoneità a Professore Associato, avendo partecipato ad una valutazione comparativa bandita dall'Università "Tor Vergata" di Roma. Successivamente è stato chiamato dalla Facoltà di Scienze Matematiche

Fisiche e Naturali dell'Università di Trieste, dove ha preso servizio come Professore Associato il 1 dicembre 2006.

Nel gennaio 2014 il Prof. Mauro Stener ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale di prima fascia per il settore concorsuale 03/A2 (Modelli e metodologie per le scienze chimiche). Ha preso servizio come Professore Ordinario di chimica fisica il 3 giugno 2019 presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche dell'Università di Trieste, dove ricopre attualmente tale posizione.

### **ATTIVITA' DIDATTICA**

Il Prof. Stener ha iniziato a tenere insegnamenti come titolare ufficiale del corso a partire dal 2000, e ha insegnato nei corsi di laurea a ciclo unico di chimica (insegnamento di chimica fisica organica) e scienze ambientali (insegnamento di chimica fisica) ha quindi insegnato nella laurea triennale di scienze ambientali (chimica fisica) e nelle lauree specialistiche e magistrali di chimica (chimica fisica 4 e chimica quantistica) e scienze ambientali (chimica fisica ambientale). Attualmente il Prof. Stener è titolare degli insegnamenti della Laurea Magistrale in Chimica "Chimica Fisica 4 e chimica Fisica dei solidi" (9 CFU) e "Quantum Chemistry" (6 CFU) quest'ultimo tenuto in lingua inglese. Le valutazioni degli studenti sono molto positive, sono state rese pubbliche e vengono allegate alla presente domanda (Titolo 17)

Per il dottorato di ricerca in chimica il Prof. Stener ha tenuto ad anni alterni, a partire dal 2010, il corso "Response theory" e il corso "Computational Chemistry".

Il Prof. Stener ha avuto anche numerose esperienze didattiche internazionali, tenendo un corso su invito presso la scuola estiva del European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling (TCCM) a Groningen nel settembre 2015, e presso la First International Training School on NanoAlloys (ISNA)" (Pisa 20-26 May 2012) sponsored by COST Action MP0903 NANOALLOY e presso la CECAM Summer School on Atomistic Simulation Techniques for Material Science, Nanotechnology, and Biophysics, 14-30 June 2017, CECAM-IT-SIDE (SISSA, Trieste Italy). Inoltre nel febbraio 2017 il Prof. Stener ha tenuto un corso di 3 crediti (ECTS) intitolato "Selected Topics in Theoretical Chemistry" avente per argomento "DFT and TDDFT: from basic theory to applications" presso l'Università di Groningen (NL) all'interno di un accordo Erasmus (staff mobility). Il Prof. Stener è responsabile di un Erasmus Agreement tra l'Università di Trieste e l'Università di Groningen (NL).

#### **- Supervisione di studenti laureandi, PhD, post-doc.**

Il Professor Stener è stato supervisore di 11 Tesi di Laurea di cui 9 di tipo internazionale nell'ambito dell' Master Europeo in chimica teorica TCCM in collaborazione con le Università di Barcellona, Groningen e Madrid. Il Professor Stener è stato supervisore di due dottorandi e di due assegnisti.

### **ATTIVITA DI RICERCA**

L'attività di ricerca del Prof. Mauro Stener si colloca nel campo della chimica teorica, e riguarda sia lo sviluppo di nuovi metodi di calcolo a livello DFT e TDDFT sia le applicazioni dei metodi sviluppati a tematiche specifiche, in particolare:

- Studio teorico dei processi di fotoionizzazione molecolare
- Studio teorico di cluster metallici

## **1. sviluppo di nuovi metodi di calcolo a livello DFT e TDDFT**

Il Prof. Stener ha iniziato a sviluppare nuovi metodi di calcolo a livello DFT e TDDFT già durante il Dottorato di ricerca, quando ha implementato un nuovo metodo TDDFT iterativo atomico in base di B-splines: utilizzando il potenziale LB94 con corretto comportamento asintotico Coulombiano è stato possibile descrivere le risonanze di autoionizzazione (Feshbach) nei gas nobili [7]. Successivamente l'algoritmo è stato esteso al caso molecolare, utilizzando un'espansione monocentrica di B-spline [27]. Poiché il metodo TDDFT iterativo ha mostrato problemi di convergenza, è stato proposto un algoritmo alternativo diretto, che è stato implementato a livello molecolare con una base di B-spline multicentrica (LCAO) [67]. Parallelamente allo sviluppo del continuo, sono anche stati sviluppati schemi per il trattamento delle eccitazioni degli elettroni di core a livello TDDFT nel discreto, che sono stati successivamente inclusi nel programma ADF, sia a livello non-relativistico [51] che a livello relativistico ZORA [69]. Più recentemente è stato proposto uno schema alternativo a quello di Casida per lo studio TDDFT del fotoassorbimento di valenza in sistemi di grandi dimensioni, come ad esempio cluster metallici con comportamento plasmonico. In queste situazioni lo schema di Casida non risulta efficiente a causa dell'elevato numero di radici necessarie. Pertanto è stato sviluppato un nuovo algoritmo basato sul calcolo della polarizzabilità dinamica complessa, che invece di diagonalizzare una matrice riconduce il calcolo ad una risoluzione di un sistema lineare la cui dimensione è quella della base ausiliaria del fitting della densità. Questo metodo è stato successivamente incluso e distribuito all'interno del codice ADF [152] ed esteso anche al calcolo del dicroismo circolare [161]. Più recentemente sono anche state sviluppate tecniche di analisi per la razionalizzazione e l'assegnamento delle features spettrali in sistemi grandi e complessi [176].

## **2. Studio teorico dei processi di fotoionizzazione molecolare**

La descrizione teorica dei processi di fotoionizzazione e' ancora un problema aperto nel settore della chimica quantistica. Infatti il fotoelettrone emesso in seguito all'assorbimento di un fotone deve essere descritto da una funzione d'onda che corrisponde ad uno stato non-legato, cioè appartenente allo spettro continuo elettronico. Le funzioni d'onda non-legate obbediscono a condizioni al contorno diverse da quelle degli stati legati, infatti mentre questi ultimi decadono esponenzialmente a grandi distanze, il continuo mantiene un comportamento asintotico oscillante. La difficoltà di gestire le opportune condizioni al contorno ha impedito fino ad ora l'affermarsi di algoritmi ed implementazioni computazionali standard in questo importante settore della chimica teorica, al contrario degli stati legati la cui descrizione e' ormai ben consolidata e di conseguenza sono disponibili molti programmi per la loro descrizione. Inoltre l'esigenza di un metodo teorico efficiente per la descrizione della fotoionizzazione e' molto sentito anche a livello sperimentale: infatti molto spesso i dati delle misure sono di difficile interpretazione diretta, e quindi la disponibilità di un metodo teorico affidabile permette una razionalizzazione ed una comprensione più approfondita dell'esperimento.

Il metodo teorico sviluppato dal Prof. Mauro Stener si basa sull'utilizzo di un Hamiltoniano di tipo Kohn-Sham, cioè nello schema tipico della Teoria del Funzionale

Densità (DFT), rappresentato in uno spazio in base finita costituito da funzioni di tipo B-spline. Le funzioni B-spline si sono dimostrate particolarmente versatili per la gestione delle condizioni al contorno degli stati non-legati, mentre l'Hamiltoniano di tipo funzionale densità rappresenta un buon compromesso tra accuratezza dei risultati e sforzo computazionale. Infatti, mentre i metodi ab-initio altamente correlati possono fornire risultati molto accurati ma solo su sistemi molto piccoli a causa della loro pesantezza computazionale, i metodi DFT sono applicabili anche a sistemi molto estesi e quindi di interesse prettamente chimico. Per questa ragione di più vasta applicabilità si è deciso di adottare lo schema DFT. Il metodo è stato sviluppato a partire da una base monocentrica (cioè con tutte le funzioni aventi la stessa origine) come descritto nelle pubblicazioni [13-15, 17, 19].

Nei lavori [20, 21, 41] è stato proposto uno schema alternativo per superare i limiti dell'approccio monocentrico: il set di funzioni di base è stato arricchito con funzioni supplementari centrate sui nuclei fuori centro. Ciò permette di trattare agevolmente quei sistemi che necessiterebbero di espansioni monocentriche troppo grandi per dare risultati convergenti.

Il metodo monocentrico è stato comunque anche impiegato per lo studio del fullerene C60 e di alcuni dei suoi derivati endoedrici M@C60 in cui un atomo metallico è stato incapsulato nella gabbia. In particolare sono state individuate intense "shape resonances" nel continuo, che sono associate alla struttura a gabbia di queste molecole sia nella valenza [22, 23] che nel core del metallo [24].

Un aspetto fondamentale del metodo, tipico di tutti gli approcci DFT, è la scelta del potenziale di scambio e correlazione. Pertanto si è deciso di esplorare le prestazioni del potenziale LB94, che ha la corretta coda Coulombiana al contrario dei potenziali correntemente impiegati nei calcoli convenzionali. I risultati ottenuti sono discussi nel riferimento [26], e dimostrano come la scelta del potenziale LB94 sia vantaggiosa. Infatti, oltre a fornire risultati più accurati in confronto alle scelte precedenti (come ad esempio VWN) soprattutto per le ionizzazioni di core, LB94 è anche computazionalmente molto più economico. Ciò ha permesso di estendere lo studio a tutte le ionizzazioni in C6H6 [29] e in C60 [36], e di affrontare grandi molecole come i complessi di metalli di transizione [30, 35, 37].

Nonostante l'impiego del potenziale LB94 con comportamento asintotico corretto l'ampia casistica di molecole studiate ha evidenziato ancora alcune discrepanze tra la teoria e l'esperimento, che sono state attribuite all'assenza, nel metodo di Kohn-Sham, degli effetti di screening. Tali effetti, però, possono essere descritti con l'estensione della teoria alla sua versione Time Dependent (TD-DFT) che negli ultimi anni si è rapidamente affermata per la descrizione accurata a livello DFT degli stati eccitati. Pertanto si è deciso di implementare un metodo TD-DFT molecolare in base di B-spline monocentriche, utilizzando un algoritmo iterativo per la risoluzione delle equazioni perturbative al primo ordine. Ciò ha fornito risultati eccellenti per la fosfina, che è la molecola su cui il metodo Kohn-Sham forniva la sezione d'urto fortemente sottostimata (circa del 70%) rispetto all'esperimento. L'implementazione computazionale e l'applicazione del metodo TD-DFT a PH3 ed N2 sono l'argomento trattato nel riferimento [27], mentre in [47, 50] il metodo è stato applicato agli idruri della prima e seconda riga, nonché all'acetilene [56]. È stato anche constatato come l'approccio TD-DFT per la fotoionizzazione sia competitivo ad

analoghi metodi ab-initio, come risulta da una ricerca condotta in collaborazione con l'Università di Pisa [34]. Viste le ottime e promettenti prestazioni del metodo TD-DFT sono stati anche considerati potenziali di scambio e correlazione ancora più evoluti di LB94. In particolare è stato studiato lo schema EXX (Exact Exchange) che ha fornito eccellenti risultati sui gas nobili, anche sui parametri di Fano associati alle autoionizzazioni, che sono estremamente sensibili alla scelta del potenziale. Questo lavoro [32] è stato condotto in collaborazione con l'Università di Monaco (Germania).

Il Dott. Stener ha proposto un nuovo algoritmo per la risoluzione del problema TDDFT, che evita il ricorso ad uno schema iterativo, con notevole guadagno sulla stabilità numerica. Tale algoritmo è stato implementato a livello atomico [44] nel caso relativistico, ed è stato anche applicato allo studio di Xe e Hg [46] e serie isoelettroniche [54].

Il Dott. Mauro Stener ha pubblicato un lavoro come unico autore in cui si estende il calcolo TD-DFT allo studio della fotoionizzazione di molecole orientate, che ha fornito risultati in ottimo accordo con recenti esperimenti effettuati con tecniche di coincidenza [45]. Questa tematica (MF-PAD) si è rivelata estremamente feconda in termini di interazione con vari gruppi sperimentali [80, 84, 87, 90, 92, 96, 103, 106, 113, 121, 124, 125, 127, 129, 135, 138, 139, 143, 147, 162, 175, 180]

Il calcolo del continuo elettronico si è dimostrato molto interessante per la modellizzazione di recenti esperimenti sulla distribuzione angolare dei fotoelettroni risolta nel tempo su molecole poliatomiche, in particolare la pirazina [48, 49] e C2 [55] Tale ricerca è stata condotta in collaborazione con T. Seideman della Northwestern University di Evanston (USA). Un'altra collaborazione, con il Prof. T. Watanabe (Tokyo Metropolitan University, Japan), si è invece sviluppata per le applicazioni del calcolo del continuo elettronico al fenomeno della Penning Ionization [62].

È stato anche sviluppato il calcolo degli effetti di dicroismo circolare in fotoemissione angolarmente risolta (CDAD), che ha portato ad un primo lavoro teorico di implementazione [57] e a una serie di successivi lavori in collaborazione con gruppi sperimentali [58,66,68,71,73,88,100,114,119,164] che hanno dimostrato la rilevanza di questa tematica innovativa. Di particolare rilievo uno studio combinato teorico sperimentale su un complesso metallico chirale che ha evidenziato un aumento notevole del CDAD in corrispondenza dell'autoionizzazione  $3p \rightarrow 3d$  del cobalto [119].

### **3. Studio teorico di cluster metallici e sistemi estesi**

La seconda tematica di ricerca coltivata dal Dott. Stener consiste nello studio teorico di proprietà di cluster metallici e sistemi estesi. Anche in questo campo l'approccio DFT si è dimostrato molto promettente, in quanto, grazie alla sua economicità di calcolo, permette lo studio di oggetti di grandi dimensioni, relativamente al campo della chimica quantistica. In questo ambito sono stati utilizzati e sviluppati programmi provenienti da altri gruppi di ricerca, come ADF (Università di Amsterdam) e PARAGAUSS (Università di Monaco, Germania) che impiegano entrambi uno schema LCAO e funzioni di base convenzionali, rispettivamente STO e GTO.

Nei lavori [8, 10, 16, 18, 28] sono stati analizzati la struttura elettronica e gli aspetti strutturali di cluster metallici e bimetallici con leganti carbonilici e tiolici.

L'interesse per questi sistemi è essenzialmente applicativo, per le loro proprietà magnetiche e in quanto modelli utili per la comprensione del legame chimico nei Self Assembled Monolayer.

In [31] è stata invece studiata una serie di clusters di nickel ricoperti di atomi di oro, che mostrano interessanti correlazioni tra struttura geometrica, struttura elettronica e magnetismo (inteso come numero di elettroni spaiati). Ciò si colloca come lavoro preliminare per lo studio ed il design di nuovi materiali dotati di speciali proprietà magnetiche.

Tutti questi studi sono stati condotti in collaborazione con l'Università Tecnica di Monaco (Germania) e rappresentano la naturale prosecuzione dell'attività di ricerca svolta dal Dott. Stener durante il post-dottorato di un anno trascorso a Monaco.

I successivi lavori [25, 33, 40, 53, 61, 63] consistono in varie applicazioni del metodo DFT a problematiche strutturali e spettroscopiche tipiche della chimica inorganica e bio-inorganica.

Nel 2003 è stato anche proposto ed implementato nel programma ADF un nuovo algoritmo, dimostratosi molto efficiente, per il calcolo delle eccitazioni elettroniche di core con il metodo TDDFT [51, 69] che poi è stato successivamente utilizzato in vari contesti: molecole libere [60, 81, 97, 101, 104, 108, 122, 136, 141, 154, 165, 171, 179] sistemi bulk [64, 75, 77, 109, 128] e molecole adsorbite su superficie [86, 95, 123, 131, 137, 148, 155, 167]. Sono stati anche considerati gli effetti vibrazionali sugli spettri NEXAFS in collaborazione con il gruppo del Prof. Yi Luo [141] e del Prof. Vincenzo Barone [154].

A partire dal 2007 il Prof. Stener ha iniziato ad interessarsi del fotoassorbimento in grandi cluster metallici, in particolare per approfondire la natura delle transizioni cosiddette plasmoniche, cioè con carattere fortemente collettivo. Poiché gli effetti plasmonici emergono quando i sistemi raggiungono dimensioni nanometriche, questa tematica rappresenta una sfida notevole per la chimica quantistica, anche a livello TDDFT in quanto i sistemi da considerare sono molto grandi (centinaia di atomi). La simmetria può essere di aiuto per i cluster liberi, ma in presenza di leganti i sistemi sono spesso privi di simmetria. Inizialmente è stato utilizzato il metodo di Casida per la risoluzione delle equazioni TDDFT, nell'implementazione di ADF, ciò ha permesso lo studio di cluster liberi simmetrici di Au e Ag [85, 91, 94, 111, 115, 118, 140, 142, 144, 145, 150, 151, 153, 156, 163, 166, 169, 170, 177].

In queste situazioni lo schema di Casida si è dimostrato poco efficiente a causa dell'elevato numero di radici necessarie per coprire un intervallo significativo di energie nello spettro calcolato. Pertanto, per superare tale limite, è stato sviluppato un nuovo algoritmo basato sul calcolo della polarizzabilità dinamica complessa, che invece di diagonalizzare una matrice riconduce il calcolo TDDFT ad una risoluzione di un sistema lineare la cui dimensione è quella della base ausiliaria del fitting della densità. Questo metodo è stato successivamente incluso e distribuito all'interno del codice ADF [152] ed esteso anche al calcolo del dicroismo circolare [161]. Più recentemente sono anche state sviluppate tecniche di analisi per la razionalizzazione e l'assegnamento delle features spettrali in sistemi grandi e complessi [176]. Questo nuovo strumento di indagine si è dimostrato molto competitivo ed ha permesso lo studio di numerose problematiche connesse con le proprietà ottiche di cluster metallici [152, 157, 158, 160, 161, 168, 172, 174, 176, 178, 181, 182]. Al momento sono in

corso ulteriori sviluppi, per considerare, ad esempio, gli effetti conformazionali dei leganti sugli spettri di assorbimento e, soprattutto, nel dicroismo circolare.

- **Indicatori bibliometrici della produzione scientifica** (da Web of Science, aggiornato al 28 novembre 2020) 193 pubblicazioni ISI tutte su giornali internazionali con referee, 4308 citazioni, h-index=35, valutazione VQR 2011-2014 eccellente su tutti e 3 prodotti conferiti, valutazione CVR (UniTS) ricercatore attivo.

- **collaborazioni nazionali ed internazionali;**

Il prof. Stener ha in corso collaborazioni nazionali con:

- 1) Alessandro Fortunelli (CNR-IPCF Pisa): su proprietà ottiche di cluster metallici
- 2) Monica De Simone (CNR-IOM): gas phase beam-line presso il sincrotrone Elettra (Trieste) su fotoassorbimento e fotoemissione di molecole in fase gassosa
- 3) Vincenzo Barone (Scuola Normale Superiore – Pisa): su struttura vibrazionale in NEXAFS e XPS.
- 4) Stefano Turchini (CNR-ISM Roma) su CDAD

Il prof. Stener ha in corso collaborazioni internazionali con:

- 1) Akira Yagishita (Photon Factory, Institute of Materials Structure Science, KEK, Tsukuba, Japan) su Molecular Frame Photoelectron Angular Distributions (MF-PAD)
- 2) Yi Luo (Theoretical Chemistry, Department of Biotechnology Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden) su: metal L-edges XANES ed effetti vibrazionali.
- 3) Ivan Powis (School of Chemistry, University of Nottingham, UK) su CDAD
- 4) Tamar Seideman (Northwestern University, Evanston, USA) su Time-Resolved Photoelectron Imaging
- 5) David Holland (Daresbury Laboratory, Daresbury, UK) sulla fotoionizzazione molecolare
- 6) Ria Broer (Theoretical Chemistry, Zernike Institute for Advanced Materials, Groningen, The Netherlands) su quantum dots di semiconduttori e cluster di oro plasmonici
- 7) Amal Dass (Mississippi University, USA) sul fotoassorbimento di cluster metallici protetti da leganti.
- 8) Thomas Bürgi (Università di Ginevra – CH) sul dicroismo circolare di cluster metallic
- 9) Kostantin Neyman (Università di Barcellona - ICREA) sulla struttura e il fotoassorbimento di nanoalloys metallici.

- **partecipazione e coordinamento di progetti di ricerca;**

- 1) Prof. Stener è stato coordinatore nazionale del progetto PRISMA INSTM 2004 "Studio dei fenomeni di fotoassorbimento di core e di valenza in materiali cristallini e nanostrutturati", Anno 2004 Prot. PC-31/2004"
- 2) partecipante PRIN 2010 "DESCARTES - Development of Energy-targeted Self-assembled supramolecular systems: a Convergent Approach through Resonant information Transfer between Experiments and Simulations"
- 3) partecipante PRIN 2008 "MODELLI TEORICI E STUDI COMPUTAZIONALI DI OSSERVABILI SPETTROSCOPICHE DI SISTEMI CONDENSATI "

- 4) partecipante PRIN 2006 "Metodi computazionali per lo studio di proprietà strutturali e dinamiche di nanoparticelle in sospensioni colloidali "
- 5) partecipante PRIN 2004 "MODELLI TEORICI E ALGORITMI COMPUTAZIONALI PER LE OSSERVABILI SPETTROSCOPICHE E LE PROPRIETA' DI RISPOSTA MOLECOLARE "
- 6) partecipante PRIN 2000 " MODELLI TEORICI E ALGORITMI PER L'INTERPRETAZIONE DI OSSERVABILI SPETTROSCOPICHE "
- 7) partecipante PRIN 1998 " Sviluppo di algoritmi per l'interpretazione di osservabili spettroscopiche "
- 8) coordinatore di due progetti IS CRA B del CINECA e partecipante di 3 IS CRA projects
- 9) coordinatore di un progetto HPC (High Performace Computing) Grant 2010 del CASPUR.
- 10) coordinatore di un progetto FRA 2014 di UniTS
- 11) assegnatario, nel 2017, del finanziamento MIUR "Fondo per le attività base di ricerca" FFABR

**- Relazioni ad invito in convegni di rilievo** (selezione, per la lista completa vedi sezione successiva intitolata "COMUNICAZIONI A CONGRESSI")

**1) M. Stener**

"Molecular Photoionization: a density functional approach with applications to circular dichroism in photoelectron angular distribution"

International Networking for Young Scientists: "Chirality in Molecular Physics"

British Council, Paris, France, 7-11 March 2005 (invited talk)

**2) M. Stener**

"A TDDFT study on the dichroism in the photoelectron angular distribution from a chiral transition metal compound"

Gordon Research Conference: "Photoions, Photoionization & Photodetachment"

January 31 - February 5, 2010, Hotel Galvez, Galveston (Texas - USA)

Invited lecture

**3) M. Stener**

" The TDDFT approach for the description of core electron excitations in bulk materials and large clusters"

Actinet I3 Workshop: Coupling XAS and Theoretical Chemistry for Heavy Atoms.

Avignon (F), 23-24 June 2010, invited talk.

**4) Mauro Stener**

"TDDFT and DFT approaches for core electron excitations: molecules, bulk materials and large clusters"

CECAM workshop on: "X-ray Spectroscopy : Recent Advances in Modelling and New Challenges" July 13, 2011 to July 15, 2011, CECAM-ETHZ, Zurich, Switzerland, keynote lecture.

**5) "Core electron excitations in molecules, large clusters and bulk materials: a TDDFT approach"**

Workshop: "Holistic Computational Spectroscopy" CMST Action CM1002 CODECS: CONvergent Distributed Environment for Computational Spectroscopy,

Pisa, Scuola Normale Superiore, 16 – 18 novembre 2011, invited lecture.



6) "C1s and F1s photoelectron angular distribution from oriented CH<sub>3</sub>F molecules: a combined theoretical TDDFT and experimental study"  
MPS2012, International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces, August 27 - September 1, 2012, Berlin (Germany), invited lecture.

7) M. Stener and O. Baseggio

"TDDFT for large systems"

Invited seminar at the ADF Developers Workshop, SCM, Vrije Universiteit Amsterdam,

February 18-20, 2014, Amsterdam, The Netherland.

8) M. Stener, G. Barcaro, L. Sementa and A. Fortunelli

"TDDFT computational study of optical photoabsorption in thiolate-protected Ag<sub>n</sub>Au<sub>m</sub> nanoclusters"

European Cost Action MP0903: "COST Action MP0903 Final Conference" Hotel Regina Elena, Santa Margherita Ligure (Genova, Italy), 5 – 9 April 2014, invited talk.

9) M. Stener

'TDDFT and DFT approaches for NEXAFS: free molecules, bulk materials and adsorbed molecules'

COST MP1306 EUSpec action first Whole Action Meeting, September 15-17, 2014 Catholic University of Louvain, Louvain la Neuve, Belgium, invited talk.

10) Oscar Baseggio, Giovanna Fronzoni and Mauro Stener

"A New Time Dependent Density Functional Algorithm for Large Systems and Plasmons in Metal Clusters"

Invited talk, 15<sup>th</sup> International Conference on Quantum Chemistry (15ICQC) , satellite meeting on Advanced Modelling of Nano Materials (AMNM) Hefei, China, 14-17 June 2015.

11) Mauro Stener and Oscar Baseggio

"The POLTDDFT module in ADF: new analysis tools for chiro-optical spectra in the TDDFT framework"

ADF Developer Meeting 2018, Vrije Universiteit Amsterdam, 26-29 March 2018, invited talk.

#### **- Appartenenza a comitati scientifici, editoriali, commissioni internazionali**

Membro eletto nel Consiglio Direttivo della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana dal 2010 la 2016 (2 mandati) , cooptato nel direttivo a partire dal 2017.

- Membro Internazionale della Jury d'Habilitation of the University of Paris-Sud 11 (January 2011)

- Opponent nella commissione di esame finale per il PhD in Theoretical Chemistry Stockholm University, three times, april 2011, june 2012, may 2016.

- referee of FIRB projects of MIUR (Italian Ministry of University and Research)

- referee of VQR review of MIUR (Italian Ministry of University and Research)

- referee for the Department Of Energy (DOE) of USA

- member of the Americal Physical Society (APS)

- referee for the following scientific journals: J. Chem. Phys., J. Phys. Chem., Chem. Phys., Chem. Phys. Letters, PCCP, Theoretical Chem. Accounts, JACS, J. Phys. B.

- Membro del Comitato Scientifico del primo, secondo, terzo, quarto e quinto congresso nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana (Pisa 2012, Padova 2013, Roma 2015, Pisa 2016, Trieste 2018).
- Membro del Comitato Organizzatore del workshop “Nanostructured Metal Optics: from Theory to Enhanced Spectroscopies, Sensing, Imaging”, Scuola Normale Superiore, Pisa, 1 aprile 2016.
- membro internazionale e Rapporteur du jury per il conferimento del Dottorato di Ricerca presso l’Université de recherche Paris Sciences et Lettres PSL Research University, Ecole doctorale n. 388, Spécialité Chimie Theorique (19 settembre 2017)
- membro internazionale del PhD examining committee per il conferimento del Dottorato di Ricerca presso l’Università di Groningen (1 febbraio 2016)

**- Capacità organizzativa nell’ambito dell’Ateneo.**

- Direttore del Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche di UniTS a partire dal 1 settembre 2018 fino al 31 agosto 2021.
- membro del Senato Accademico dell’Università di Trieste dal 1 novembre 2018 al 31 ottobre 2021.
- Vice-Direttore del Dipartimento di Scienze Chimiche di UniTS dal Novembre 2008 al Novembre 2010 e del Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche di UniTS dal 1 settembre 2015 al 31 agosto 2018.
- Rappresentante di Ateneo nel Consiglio Direttivo del consorzio INSTM dal novembre 2009 al novembre 2015.
- Coordinatore del Dottorato in Chimica da giugno 2012 a ottobre 2017.
- è stato membro della giunta di dipartimento con delega per la Biblioteca
- è stato membro della commissione didattica della Laurea Specialistica del Corso di Studi in Chimica

**- Capacità di divulgazione e di terza missione**

Il Prof. Stener propone da più di 10 anni il seminario tematico “Le nanotecnologie” per le scuole secondarie della Regione FVG, che è stato svolto nell’ambito del Progetto Lauree Scientifiche (PLS) per avvicinare i giovani alla chimica.

## Elenco delle pubblicazioni del Dr. Mauro Stener

- 1) P. Decleva, G. Fronzoni, A. Lisini and M. Stener,  
"Molecular orbital description of core excitation spectra in transition metal compounds. An ab-initio CI calculation on  $\text{TiCl}_4$  and isoelectronic molecules.",  
Chem. Phys., 186 (1994) 1.
- 2) M. Stener, A. Lisini and P. Decleva,  
"LCAO density functional calculations of core binding energy shifts of large molecules",  
J. Electron Spectrosc. and Related Phenom., 69 (1994) 197.
- 3) M. Stener, A. Lisini and P. Decleva,  
"Accurate local density photoionization cross sections by LCAO Stieltjes Imaging approach",  
Int. J. Quantum Chem., 53 (1995) 229.
- 4) M. Stener, A. Lisini and P. Decleva,  
"Density Functional calculations of excitations energies and oscillator strengths for  $\text{C}1s \rightarrow \pi^*$  and  $\text{O}1s \rightarrow \pi^*$  excitations and ionization potentials in carbonyl containing molecules.",  
Chem. Phys., 191 (1995) 141.
- 5) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini,  
"Molecular photoionization cross sections by the local density LCAO Stieltjes Imaging approach",  
J. Electron Spectrosc. and Related Phenom., 74 (1995) 29.
- 6) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini,  
"Calculations of giant resonances and cross section profiles of valence ionizations of cubane by LCAO density functional Stieltjes imaging approach",  
J. of Molecular Structure (Theochem) 357 (1995) 125.
- 7) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini,  
"Density Functional - Time Dependent Local Density Approximation Calculations of Autoionization Resonances in Noble Gases",  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 28 (1995) 4973
- 8) U. Heiz, A. Vayloyan, E. Schumacher, C. Yeretizian, M. Stener, P. Gisdakis and N. Rösch,  
" $\text{Na}_x\text{Au}$  and  $\text{Cs}_x\text{Au}$  bimetal clusters: Finite size analogs of sodium-gold and cesium-gold compounds"  
J. Chem. Phys., 105 (1996) 5574
- 9) G. Fronzoni, M. Stener, A. Lisini and P. Decleva,

"Ab initio and density functional calculations of core excitation spectra of CO, H<sub>2</sub>CO and F<sub>2</sub>CO"  
Chem. Phys. 210 (1996) 447.

10) O. D. Häberlen, S. C. Chung, M. Stener and N. Rösch,  
"From Clusters to Bulk. A Relativistic Density Functional Investigation on a series of Gold Clusters Au<sub>n</sub>, n = 6 ... 147."  
J. Chem. Phys., 106 (1997) 5189.

11) M. Stener, G. De Alti, G. Fronzoni and P. Decleva  
"TDLDA Calculations of Photoionization Cross Section and Asymmetry Parameter Profiles of Alkaline-Earth Atoms"  
Chem. Phys., 222 (1997) 197.

12) M. Stener and P. Decleva  
"Photoionization of Zinc by TDLDA calculations"  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 30 (1997) 4481.

13) G. Fronzoni, M. Stener, P. Decleva and G. De Alti  
"Theoretical study of the Cl 1s and 2p near edge photoabsorption spectra of HCl by accurate ab-initio CI and density functional approaches"  
Chem. Phys., 232 (1998) 9.

14) M. Stener and P. Decleva  
"Photoionization of first and second row hydrides by the B-spline one-centre expansion density functional method"  
J. of Electron Spectrosc. and Related Phenom, 94 (1998) 195.

15) M. Venuti, M. Stener and P. Decleva  
"Valence photoionization of C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> by the B-spline one-centre expansion density functional method"  
Chem. Phys., 234 (1998) 95.

16) J. Sinzig, L. J. de Jongh, A. Ceriotti, R. della Pergola, G. Longoni, M. Stener, K. Albert and N. Rösch,  
"Molecular magnetic quantum dots in multivalent metal cluster compounds"  
Phys. Rev. Lett. , 81 (1998) 3211.

17) M. Stener, G. De Alti and P. Decleva  
"Convergence of density functional one-centre expansion for the molecular continuum: N<sub>2</sub> and (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>N"  
Theoretical Chemistry Accounts (Theor. Chim. Acta), 101 (1999) 247.

18) M. Stener, K. Albert and N. Rösch,

- "Relativistic density functional study on the bimetallic cluster  $[\text{Pt}_3\text{Fe}_3(\text{CO})_{15}]^{n-}$  ( $n = 0, 1, 2$ )"  
Inorganica Chimica Acta, 286 (1999) 30.
- 19) M. Stener and P. Decleva.  
"Photoionization of  $\text{CH}_4$ ,  $\text{SiH}_4$ ,  $\text{BH}_3$  and  $\text{AlH}_3$  by the B-spline one-centre expansion density functional method",  
J. of Electron Spectrosc. and Related Phenom, 104 (1999) 135.
- 20) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva,  
"Theoretical study of the excited and continuum states in the NEXAFS region of  $\text{Cl}_2$ ",  
Phys. Chem. Chem. Phys., 1 (1999) 1405.
- 21) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva,  
"Theoretical description of the NEXAFS Cl 1s and 2p spectra of  $\text{ClF}$  and  $\text{ClF}_3$ ",  
Chem. Phys., 246 (1999) 127.
- 22) M. Venuti, M. Stener, G. De Alti and P. Decleva,  
"Photoionization of  $\text{C}_{60}$  by large scale one-centre density functional explicit continuum wave-function",  
J. Chem. Phys., 111 (1999) 4589.
- 23) M. Stener, G. Fronzoni, M. Venuti and P. Decleva  
"Photoionization of  $\text{M}@\text{C}_{60}$  ( $\text{M} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$ ) by large scale one-centre density functional explicit continuum wave-function",  
Chem. Phys. Lett., 309 (1999) 129.
- 24) P. Decleva, G. De Alti, G. Fronzoni and M. Stener  
"Theoretical study of resonances in the metal core photoionization of  $\text{M}@\text{C}_{60}$  ( $\text{M} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$ )",  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 32 (1999) 4523.
- 25) M. Stener and M. Calligaris,  
"Density functional study of structural properties and binding energies of dimethylsulfoxide Ru(II) complexes",  
J. of Molecular Structure (Theochem), 497 (2000) 91.
- 26) M. Stener, S. Furlan and P. Decleva  
"Density Functional calculations of photoionization with an exchange – correlation potential with the correct asymptotic behaviour",  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 33 (2000) 1081.
- 27) M. Stener and P. Decleva  
"Time-Dependent Density Functional calculations of molecular photoionization cross sections:  $\text{N}_2$  and  $\text{PH}_3$ "  
J. Chem. Phys., 112 (2000) 10871.

- 28) S. Krüger, M. Stener, M. Mayer, F. Nörtemann and N. Rösch  
"Gold-Thiolate Complexes: a Density Functional Study of Geometry and Electronic Structure"  
J. of Molecular Structure (Theochem), 527 (2000) 63.
- 29) M. Stener, S. Furlan and P. Decleva  
"Density functional calculations of valence and core photoionization of  $C_6H_6$  with an exchange-correlation potential with the correct asymptotic behaviour"  
Phys. Chem. Chem. Phys. 3 (2001) 19.
- 30) M. Stener, G. Fronzoni, S. Furlan and P. Decleva  
"Photoionization of  $[(\eta-C_6H_6)_2Cr]$  with the explicit continuum B-spline density functional method"  
J. Chem. Phys., 114 (2001) 306.
- 31) Sven Krüger, Mauro Stener and Notker Rösch  
"Relativistic Density Functional Study of Gold Coated Magnetic Nickel Clusters"  
J. Chem. Phys., 114 (2001) 5207.
- 32) M. Stener, P. Decleva and A. Görling  
"The role of exchange and correlation in time-dependent density-functional theory for photoionization"  
J. Chem. Phys. 114 (2001) 7816.
- 33) Elisabetta Iengo, Ennio Zangrando, Stefano Mestroni, Giovanna Fronzoni, Mauro Stener and Enzo Alessio,  
"Complexed bridging ligands: oxorhenium(V) compounds with mono-coordinated pyrazine or pyrimidine as versatile building-blocks for the construction of polynuclear architectures"  
J. Chem. Soc., Dalton Trans., 8 (2001) 1338.
- 34) M. Stener, P. Decleva, I. Cacelli, R. Moccia and R. Montuoro  
"Response function study of CO photoionization: ab-initio SCF and density functional results"  
Chem. Phys., 272 (2001) 15.
- 35) G. Fronzoni, P. Colavita, M. Stener, G. De Alti, and P. Decleva,  
"Theoretical study of photoionization processes in  $Fe(C_5H_5)_2$ "  
J. Phys. Chem. A 105 (2001) 9800.
- 36) P. Colavita, G. De Alti, G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva  
"Theoretical study of the valence and core photoemission spectra of  $C_{60}$ "  
Phys. Chem. Chem. Phys. 3 (2001) 4481
- 37) G. Fronzoni, M. Stener, S. Furlan, and P. Decleva

“ Theoretical study of the photoionization shape resonances of Cobaltocene and Nickelocene ”  
Chem. Phys., 273 (2001) 117.

38) P. Decleva, S. Furlan, G. Fronzoni and M. Stener  
“High energy oscillations in the valence photoionization partial cross section of C<sub>60</sub>”  
Chem. Phys. Lett. 348 (2001) 363.

39) M. Stener and P. Decleva,  
“The description of the photoionization process by the B-spline density functional method”  
in: Recent Advances in Density Functional Methods, Vol. III, V. Barone, A. Bencini and P. Fantucci eds., World Scientific Publishing Company, Singapore 2002.

40) Lucio Randaccio, Silvano Geremia, Mauro Stener, Daniele Toffoli and Ennio Zangrando,  
“Electronic properties of the axial Co-C and Co-S bonds in B<sub>12</sub> systems: a density functional study”  
Eur. J. In. Chem. (2002) 93.

41) D. Toffoli, M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva  
"Convergence of the multicenter B-spline DFT approach for the continuum"  
Chem. Phys., 276 (2002) 25.

42) M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva  
“Time Dependent Density Functional Study of the Symmetry Resolved N 1s Photoionization in N<sub>2</sub>”  
Chem. Phys. Lett., 351 (2002) 469.

43) M. Stener, G. Fronzoni, D. Toffoli, P. Colavita, S. Furlan and P. Decleva  
"Valence and core photoemission in M@C<sub>60</sub> (M = Be, Mg, Ca)"  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 35 (2002) 1421.

44) D. Toffoli, M. Stener and P. Decleva  
“Application of the Relativistic Time Dependent Density Functional Theory to the photoionization of Xenon”  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 35 (2002) 1275.

45) M. Stener  
“Photoionization of oriented molecules: a time dependent density functional approach”  
Chem. Phys. Lett., 356 (2002) 153.

46) D. Toffoli, M. Stener and P. Decleva  
“Photoionization of Mercury: a relativistic Time-Dependent-Density Functional Theory Approach”  
Phys. Rev. A 66 (2002) 012501.

- 47) M. Stener, G. Fronzoni, D. Toffoli and P. Decleva  
“Time Dependent Density Functional Photoionization of CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O and HF”  
Chem. Phys., 282 (2002) 337.
- 48) Yoshi-ichi Suzuki, Mauro Stener and Tamar Seideman,  
“Theory of time-resolved photoelectron imaging. Nonperturbative calculation for an internally converting polyatomic molecule”  
Phys. Rev. Letters, 89 (2002) 233002.
- 49) Yoshi-ichi Suzuki, Mauro Stener and Tamar Seideman,  
“Multidimensional calculation of time-resolved photoelectron angular distribution. The internal conversion dynamics of pyrazine”  
J. Chem. Phys., 118 (2003) 4432.
- 50) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva  
“Dramatic Response Effects in the photoionization of the second row hydrides: a time dependent density functional investigation”  
J. Chem. Phys., 118 (2003) 10051.
- 51) M. Stener, G. Fronzoni and M. de Simone  
“Time Dependent Density Functional Theory of Core Electrons Excitations ”  
Chem. Phys. Lett., 373 (2003) 115.
- 52) G. Fronzoni, M. Coreno, M. de Simone, P. Franceschi, C. Furlani, S. Furlan, K. C. Prince, M. Stener and P. Decleva  
“High Resolution Inner-shell Spectroscopy and ab-initio CI calculations on TiCl<sub>4</sub> and isoelectronic molecules”  
Phys. Chem. Chem. Phys, 5 (2003) 2758.
- 53) Giovanni Tazher, Renata Dreos, Alessandro Felluga, Giorgio Nardin, Lucio Randaccio and Mauro Stener  
“Intramolecular and Intermolecular O-H-O Hydrogen Bond in Some Nickel(II) Complexes with Tridentate Amino-oxime Ligands”  
Inorg. Chim. Acta, 355 (2003) 361-367.
- 54) D. Toffoli, M. Stener and P. Decleva  
“3d Photoionization along the Xenon isoelectronic series”  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 36 (2003) 3097.
- 55) Yoshi-ichi Suzuki, Mauro Stener and Tamar Seideman,  
“Theory of Time-Resolved Photoelectron Imaging. Comparison of a Density Functional with a Time-Dependent Density Functional Approach”  
J. Chem. Phys., 120 (2004) 1172-1180.
- 56) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva,



“Valence and core photoionization dynamics of Acetylene by TD-DFT continuum approach”,  
Chem. Phys., 298 (2004) 141-153.

57) M. Stener, G. Fronzoni, D. Di Tommaso and P. Decleva  
“Density Functional study on the Circular Dichroism of photoelectron Angular Distribution from chiral derivatives of oxirane”  
J. Chem. Phys., 120 (2004) 3284 – 3296.

58) S. Turchini, N. Zema, G. Contini, G. Alberti, M. Alagia, S. Stranges, G. Fronzoni, M. Stener, P. Decleva and T. Prosperi,  
“Circular Dichroism in photoelectron spectroscopy of Free Chiral Molecules: Experiment and Theory on Methyl-oxirane”  
Phys. Rev. A 70 (2004) 014502-1, 014502-4

59) J. Schiessling, M. Stener, T. Balasubramanian, L. Kjeldgaard, P. Decleva, J. Nordgren and P. A. Brühwiler,  
“Origin of Molecular Orbital Splitting of C60 on Al(110)”,  
J. Phys.: Condens. Matter 16 (2004) L407-L414

60) G. Fronzoni, M. Stener, A. Reduce and P. Decleva  
“Time Dependent Density Functional Theory Calculations of Ligand K-Edge and Metal L-Edge X-Ray Absorption of a Series of Oxomolybdenum Complexes”  
J. Phys. Chem. A, 108 (2004) 8467 – 8477.

61) Corrado Crotti, Erica Farnetti, Teresa Celestino, Mauro Stener, and Stefano Fontana,  
“Donor properties of diphosphine ligands in tungsten carbonyl complexes: synchrotron radiation XPS measurements and DFT calculations”  
Organometallics, 23 (2004) 5219-5225.

62) T. Watanabe and M. Stener  
”Collisional de-excitation process of excited atoms by axially symmetric molecules”  
J. Chem. Phys., 121 (2004) 9948-9958.

63) Alessandro Scarel, Barbara Milani, Ennio Zangrando, Mauro Stener, Sara Furlan, Giovanna Fronzoni, Giovanni Mestroni, Serafino Gladiali, Carla Carfagna and Luca Mosca  
“Palladium complexes with 3-alkyl-substituted-1,10-phenanthrolines: effect of the remote alkyl substituent on the CO/olefin copolymerization reactions”  
Organometallics, 23 (2004) 5593-5605.

64) M. Stener, G. Fronzoni and R. De Francesco  
“Core excitations in MgO: a DFT study with cluster models”  
Chem. Phys., 309 (2005) 49-58.

- 65) G. Fronzoni, R. De Francesco and M. Stener  
“Time Dependent Density Functional Theory of X-Ray absorption spectroscopy of alkaline-earth oxides”  
J. Phys. Chem. B, 109 (20) (2005) 10332-10340.
- 66) Anna Giardini, Daniele Catone, Stefano Stranges, Mauro Satta, Mario Tacconi, Susanna Piccirillo, Stefano Turchini, Nicola Zema, Giorgio Contini, Tommaso Prosperi, Pietro Decleva, Devis Di Tommaso, Giovanna Fronzoni, Mauro Stener, Antonello Filippi, Maurizio Speranza  
"Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy of Randomly Oriented 3-Hydroxytetrahydrofuran Enantiomers"  
Chem. Phys Chem, 6 (2005) 1164-1168
- 67) M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva  
“Time Dependent Density Functional Theory for molecular photoionization with non-iterative algorithm and multicenter B-spline basis set: CS<sub>2</sub> and C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> case studies”  
J. Chem. Phys., 122 (2005) 234301.
- 68) S. Stranges, S. Turchini, M. Alagia, G. Alberti, G. Contini, P. Decleva, G. Fronzoni, M. Stener, N. Zema and T. Prosperi  
“Valence Photoionization Dynamics in Circular Dichroism of Chiral Free Molecules: the Methyl-Oxirane”  
J. Chem. Phys, 122 (2005) 244303
- 69) G. Fronzoni, M. Stener, P. Decleva, F. Wang, T. Ziegler E. van Lenthe and E. J. Baerends  
"Spin-Orbit Relativistic Time Dependent Density Functional Theory calculations for the description of core electron excitations: TiCl<sub>4</sub> case study"  
Chem. Phys. Lett., 416 (2005) 56-63.
- 70) P. Decleva, G. Fronzoni, M. Stener, M. de Simone, M. Coreno, J. C. Green, N. Hazari and O. Plekan,  
"Strong oscillations in molecular valence photoemission intensities"  
Phys. Rev. Letters, 95 (2005) 263401 1-4.
- 71) M. Stener, D. Di Tommaso, G. Fronzoni, P. Decleva and I. Powis  
“Theoretical study on the circular dichroism in core and valence photoelectron angular distributions of camphor enantiomers”  
J. Chem. Phys., 124 (2006) 024326 1-10.
- 72) M. Stener, D. Toffoli, G. Fronzoni and P. Decleva  
“Time Dependent Density Functional study of the photoionization dynamics of SF<sub>6</sub>”  
J. Chem. Phys, 124 (2006) 114306 (1-13).
- 73) Devis Di Tommaso, M. Stener, G. Fronzoni, and P. Decleva

"Conformational effects on the Circular Dichroism in the Photoelectron Angular Distribution"  
ChemPhysChem, 7 (2006) 924-934.

74) D. Toffoli, M. Stener and P. Decleva,  
"Photoabsorption and Photoionization dynamics study of Silicon Tetrafluoride in the framework of the Time-Dependent Density-Functional-Theory"  
Phys. Rev. A, 73 (2006) 042704 (1-14)

75) G. Fronzoni, R. de Francesco, M. Stener, M. Causà',  
" X-Ray absorption spectroscopy of titanium oxide by Time Dependent Density Functional calculations "  
J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 9899-9907.

76) D. Toffoli, M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva  
"Photoionization Cross Section and Angular Distribution Calculations of Carbon Tetrafluoride"  
J. Chem. Phys., 124 (2006) 214313 1-10.

77) R. De Francesco, M. Stener, M. Causà, D. Toffoli and G. Fronzoni  
"Time Dependent Density Functional investigation of the near-edge absorption spectra of V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>",  
Phys. Chem. Chem. Phys., 8 (2006) 4300-4310.

78) Jérôme Durand, Ennio Zangrando, Mauro Stener, Giovanna Fronzoni, Carla Carfagna, Barbara Binotti, Paul C. J. Kamer, Christian Müller, Maria Caporali, Piet W. N. M. van Leeuwen, Dieter Vogt, Barbara Milani  
"Long Lived Palladium Catalysts for CO/Vinyl Arene Polyketones Synthesis: A Solution to Deactivation Problems"  
Chemistry: a European Journal, 12 (2006) 7639 - 7651.

79) Corrado Crotti, Erica Farnetti, Serena Filipuzzi, Mauro Stener, Ennio Zangrando and Paolo Moras,  
"Evaluation of the Donor Ability of Phenantrolines in Iridium Complexes by Means of Synchrotron Radiation Photoemission Spectroscopy and DFT Calculations",  
Dalton Trans. (2007) 133-142.

80) J. Adachi, K. Ito, H. Yoshii, M. Yamazaki, A. Yagishita, M. Stener and P. Decleva  
"Site-specific photoemission dynamics of N<sub>2</sub>O molecules probed by fixed-molecule core-level photoelectron angular distributions"  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 40 (2007) 29-47.

81) G. Fronzoni, R. De Francesco, M. Stener and P. Decleva  
" Spin-Orbit Relativistic calculations of the core excitation spectra of SO<sub>2</sub>"  
J. Chem. Phys., 126 (2007) 134308 1-10.

- 82) M. Stener, D. Toffoli, G. Fronzoni and P. Decleva  
"Recent advances in molecular photoionization by density functional theory based approaches",  
Theor. Chem. Acc., 117 (2007) 943 - 956.
- 83) P Decleva, M Stener, D M P Holland, A W Potts and L Karlsson  
" Perfluoro effects in the occupied and virtual valence orbitals of hexafluorobenzene "  
J. Phys. B, At. Mol. Opt. Phys., 40 (2007) 2939 - 2959.
- 84) T. Teramoto, J. Adachi, K. Hosaka, M. Yamazaki, K. Yamanouchi, N. A. Cherepkov, M. Stener, P. Decleva and A. Yagishita  
" New approach for a complete experiment: C1s photoionization in CO<sub>2</sub> molecules "  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 40 (2007) F241-F250.
- 85) M. Stener, A. Nardelli, R. De Francesco and G. Fronzoni,  
"Optical excitations of gold nanoparticles: a quantum chemical scalar relativistic Time Dependent Density Functional study"  
J. Phys. Chem. C, 111 (2007) 11862 - 11871.
- 86) G. Fronzoni, R. De Francesco and M. Stener  
"TDDFT calculations of NEXAFS spectra of model systems for SO<sub>2</sub> adsorbed on the MgO (100) surface"  
J. Phys. Chem. C, 111 (2007) 13554 - 13563.
- 87) T. Teramoto, J. Adachi, M. Yamazaki, K. Yamanouchi, M. Stener, P. Decleva and A. Yagishita  
"Extensive study on the C1s photoionization of CS<sub>2</sub> molecules by multi-coincidence velocity-map imaging spectrometry"  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 40 (2007) 4033 - 4046.
- 88) D. Catone, S. Turchini, G. Contini, N. Zema, S. Irrera, T. Prospero, M. Stener, D. Di Tommaso, and P. Decleva  
"2-amino-1-propanol vs 1-amino-2-propanol: valence band and C 1s core-level photoelectron spectra"  
J. Chem Phys., 127 (2007) 144312 (1-10).
- 89) Sofia Derossi, Massimo Casanova, Elisabetta Iengo, Ennio Zangrando, Mauro Stener, Enzo Alessio  
"Self-assembled metallacycles with pyrazine edges: a new example in which the *unexpected* molecular triangle prevails over the *expected* molecular square"  
Inorg. Chem., 46 (2007) 11243 - 11253.
- 90) H. Fukuzawa, X.-J. Liu, T. Teranishi, K. Sakai, G. Prümper, K. Ueda, Y. Morishita, N. Saito, M. Stener and P. Decleva  
"Fluorine K-shell photoelectron angular distribution from CF<sub>4</sub> molecules in the molecular frame"

Chem. Phys. Lett., 451 (2008) 182-185.

91) M. Stener, A. Nardelli and G. Fronzoni

"Spin-orbit effects in the photoabsorption of  $W_{Au_{12}}$  and  $Mo_{Au_{12}}$ : a relativistic Time Dependent Density Functional study"

J. Chem. Phys., 128 (2008) 134307 (1-9)

92) Masakazu Yamazaki, Jun-ichi Adachi, Yasuyuki Kimura, Akira Yagishita, Mauro Stener, Piero Decleva, Nobuhiro Kosugi, Hiroshi Iwayama, Kiyonobu Nagaya, and Makoto Yao

"Decay Channel Dependence of the Photoelectron Angular Distributions in Core Level Ionization of Ne Dimers"

Phys. Rev. Lett., 101 (2008) 043004.

93) M. Causa', V. Barone, M. Stener and G. Fronzoni,

"Electrostatic effects on cluster simulation of ionic crystals and surfaces"

Journal of Physics: Conference Series, 117 (2008) 012009 (1-8).

94) M. Stener, A. Nardelli and G. Fronzoni

"Theoretical study on the photoabsorption of  $MAu_{12}^-$  ( $M = V, Nb, Ta$ )"

Chem. Phys. Lett. 462 (2008) 358-364.

95) R. De Francesco, M. Stener and G. Fronzoni

"S K-edge NEXAFS Spectra of Model Systems for  $SO_2$  on  $TiO_2(110)$  : a TDDFT Simulation"

Phys. Chem. Chem. Phys. 11 (2009) 1146-1151.

96) Masakazu Yamazaki, Jun-ichi Adachi, Takahiro Teramoto, Akira Yagishita, M. Stener and P. Decleva

"3-D mapping of photoemission from a single oriented  $H_2O$  molecule"

J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 42 (2009) 051001.

97) G. Fronzoni, M. Stener, P. Decleva, M. de Simone, M. Coreno, P. Franceschi, C. Furlani and K. C. Prince

"X-Ray absorption spectroscopy of  $VOCl_3$ ,  $CrO_2Cl_2$  and  $MnO_3Cl$ : an experimental and theoretical study"

J. Phys. Chem. A, 113 (2009) 2914 - 2925.

98) M. Stener G. Fronzoni and P. Decleva

"Time Dependent Density Functional Theory description of giant resonances in transition metal complexes: the photoionization dynamics of  $Cr(CO)_6$ "

Chem. Phys., 361 (2009) 49-60.

99) Francesco L. Brancia, Mauro Stener and Alessandra Magistrato

"A Density Functional Theory (DFT) Study on Gas-Phase Proton Transfer Reactions of Derivatized and Underivatized Peptide Ions generated by Matrix-assisted Laser Desorption Ionization"

J. Am. Soc. Mass Spectrom., 20 (2009) 1327-1333.

100) S. Turchini, D. Catone, G. Contini, N. Zema, S. Irrera, M. Stener, D. Di Tommaso, P. Decleva and T. Prosperi

"Conformational effects in photoelectron circular dichroism of alaninol"

ChemPhysChem, 10 (2009) 1839 - 1846.

101) A. Nardelli, G. Fronzoni and M. Stener

"Theoretical study on the X-Ray absorption at the sulphur K-edge in gold nanoparticles protected by thiolates"

J. Phys. Chem. C, 113 (2009) 14844 - 14851.

102) D. M. P. Holland, D. A. Shaw, M. Stener and P Decleva

"A study of the valence shell electronic structure of hexafluorobenzene using photoabsorption and photoelectron spectroscopy, and TDDFT calculations"

J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 42 (2009) 245201.

103) T. Osipov, M. Stener, A. Belkacem, M. Scöffler, Th. Weber, L. Schmidt, A. Landers, M. H. Prior, R. Dörner and C. L. Cocke

"Carbon K-shell photoionization of fixed-in-space C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>"

Phys. Rev. A, 81 (2010) 033429 (1-12).

104) A. Kivimäki, J. Álvarez Ruiz, M. Coreno, M. Stankiewicz, G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva

"S 2p photoabsorption of the SF<sub>5</sub>CF<sub>3</sub> molecule: experiment, theory and comparison with SF<sub>6</sub>"

Chem. Phys., 375 (2010) 101-109.

105) S. Korica, A. Reinköster, M. Braune, J. Viefhaus, D. Rolles, B. Langer, G. Fronzoni, D. Toffoli, M. Stener, P. Decleva, O. M. Al-Dossary and U. Becker.

"Partial photoionization cross sections of C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub>: a gas versus adsorbed phase comparison"

Surface Science, 604 (2010) 1940-1944.

106) Masakazu Yamazaki, Jun-ichi Adachi, Yasuyuki Kimura, Mauro Stener, Piero Decleva and Akira Yagishita

"N 1s photoelectron angular distributions from fixed-in-space NO<sub>2</sub> molecules: Stereodynamics and symmetry considerations"

J. Chem. Phys. 133 (2010) 164301 1-9.

- 107) J. Schiessling, A. Grigoriev, M. Stener, L. Kjeldgaard, T. Balasubramanian, P. Decleva, R. Ahuja, J. Nordgren and P. A. Brühwiler,  
"The role of charge-charge correlations and covalent bonding in the electronic structure of adsorbed C<sub>60</sub>: C<sub>60</sub>/Al"  
J. Phys.Chem. C, 114 (2010) 18686 - 18692.
- 108) A. Nardelli, G. Fronzoni and M. Stener  
"Theoretical study of sulphur L-edge XANES of thiol protected gold nanoparticles"  
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 480-487.
- 109) R. De Francesco, M. Stener and G. Fronzoni  
"Computational investigation of the L2,3-edge spectra of bulk and (110) surface of rutile TiO<sub>2</sub>"  
Surface Science, 605 (2011) 500-506.
- 110) M. Stener, P. Decleva, D. M. P. Holland and D. A. Shaw,  
"A study of the valence shell electronic states of pyrimidine and pyrazine by photoabsorption spectroscopy and time-dependent density functional theory calculations"  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 44 (2011) 075203 (1 - 18).
- 111) Nicola Durante, Alessandro Fortunelli, Michel Broyer and Mauro Stener  
"Optical properties of Au nanoclusters from TD-DFT calculations"  
J. Phys. Chem. C, 115 (2011) 6277 - 6282.
- 112) Mauro Stener, Paola Bolognesi, Marcello Coreno, Patrick O'Keeffe, V. Feyer, Giovanna Fronzoni, Piero Decleva, Lorenzo Avaldi, and Antti Kivimäki  
"Photoabsorption and S 2p photoionization of the SF<sub>6</sub> molecule: resonances in the excitation energy range of 200-280 eV"  
The Journal of Chemical Physics, 134 (2011) 174311 (1-9)
- 113) Mauro Stener, Piero Decleva, Masakazu Yamazaki, Jun-ichi Adachi and Akira Yagishita  
"O1s photoionization dynamics in oriented NO<sub>2</sub>"  
J. Chem. Phys. 134 (2011) 184305 (1-11).
- 114) S. Stranges, M. Alagia, P. Decleva, M. Stener, G. Fronzoni, D. Toffoli, M. Speranza, D. Catone, S. Turchini, T. Prosperi, N. Zema, G. Contini and Y. Keheyan  
"Valence electronic structure and conformational flexibility of Epichlorohydrin"  
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 12517 - 12528.
- 115) Mauro Del Ben, Remco W. A. Havenith, Ria Broer and Mauro Stener  
"Density Functional Study on Morphology and Photoabsorption of CdSe Nanoclusters"  
J. Phys. Chem. C, 115 (2011) 16782 - 16796.

- 116) D.M.P. Holland, A.W. Potts, L. Karlsson, M. Stener, P. Decleva  
"A study of the valence shell photoionisation dynamics of pyrimidine and pyrazine"  
Chem. Phys., 390 (2011) 25 -35.
- 117) Daniele Toffoli, Mauro Stener, Giovanna Fronzoni and Piero Decleva,  
"Computational characterization of the HOMO-2 photoemission intensity oscillations  
in C<sub>60</sub>"  
Chem. Phys. Lett., 516 (2011) 154 – 157.
- 118) Giovanni Barcaro, Michel Broyer, Nicola Durante, Alessandro Fortunelli and  
Mauro Stener,  
"Alloying effects on the optical properties of Ag-Au nanoclusters from TDDFT  
calculations"  
Journal of Physical Chemistry C, 115 (2011) 24085 – 24091.
- 119) D. Catone, M. Stener, P. Decleva, G. Contini, N. Zema, T. Prosperi, V. Feyer, K.  
C. Prince and S. Turchini,  
"Resonant circular dichroism of chiral metal-organic complex"  
Phys. Rev. Letters, 108 (2012) 083001 (1-5).
- 120) P. Decleva, G. Fronzoni and M. Stener  
"Giant correlation effects in the photoelectron spectrum of Ni(C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>: clues from  
accurate calculation of ionization cross-sections"  
Theoretical Chemistry Accounts, 131 (2012) 1185.
- 121) T. Mizuno, J. Adachi, N. Miyauchi, M. Kazama, M. Stener, P. Decleva and  
A. Yagishita  
"F 1s photoelectron angular distributions of BF<sub>3</sub> in the molecular frame as a sensitive  
tool of shape resonance dynamics"  
J. Chem. Phys. 136 (2012) 074305.
- 122) G. Fronzoni, R. De Francesco and M. Stener,  
"Theoretical study of near edge x-ray absorption fine structure spectra of metal  
phthalocyanines at C and N K-edges"  
J. Phys. Chem. A, 116 (2012) 2885 – 2894.
- 123) Fronzoni, Giovanna; Balducci, Gabriele; De Francesco, Renato; Romeo, Michele;  
Stener, Mauro  
"Density Functional Theory Simulation of NEXAFS Spectra of Molecules Adsorbed  
on Surfaces: C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> on Si(100) Case Study"  
J. Phys. Chem. C, 116 (35) (2012) 18910-18919.
- 124) M. Stener, P. Decleva, J. Adachi, N. Miyauchi, M. Yamazaki, and A. Yagishita  
"Recoil frame photoelectron angular distributions in core O 1s ionization of H<sub>2</sub>CO"  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 45 (2012) 194004 (1 - 9).



- 125) C. Bomme, R. Guillemin, T. Marin, L. Journal, T. Marchenko, N. Trcera, R.K. Kushawaha, M.N. Piancastelli, M. Simon, M. Stener and P. Decleva  
 “Molecular-frame photoelectron angular distribution imaging studies of OCS S1s photoionization”  
 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 45 (2012) 194005 (1 - 12).
- 126) Mauro Stener, Giovanna Fronzoni and Renato De Francesco  
 "Time Dependent Density Functional Theory of core electron excitations: from implementation to applications"  
 in "Theoretical and Computational Developments in Modern Density Functional Theory", page 103 – 148, Series: Physics Research and Technology, Nova Science Publishers, NY, USA, Hardcover, October 2012, ISBN: 978-1-61942-779-2, Editor: Amlan K. Roy.
- 127) Misato Kazama, Hiroshi Shinotsuka, Takashi Fujikawa, Mauro Stener, Piero Decleva, Jun-ichi Adachi, Tomoya Mizuno, Akira Yagishita,  
 “Multiple-scattering calculations for 1s photoelectron angular distributions from single oriented molecules in the energy region above 50 eV”  
 J. Electron Spectrosc. Related Phenom., 185 (2012) 535-545.
- 128) Giovanna Fronzoni, Renato De Francesco and Mauro Stener  
 “L<sub>2,3</sub> edge photoabsorption spectra of bulk V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>: a two components relativistic Time Dependent Density Functional Theory description with finite cluster model”  
 J. Chem. Phys. 137 (2012) 224308 (7 pages)
- 129) T. Mizuno, J. Adachi, M. Kazama, M. Stener, P. Decleva and A. Yagishita  
 “Angular Correlation Between B K-VVAuger Electrons of BF<sub>3</sub> Molecules and Coincident Fragment Ions: Manifestation of the Difference Between the Angular Correlation and Molecular Frame Auger Electron Angular Distribution”  
 Phys. Rev. Letters, 110 (2013) 043001 (5 pages)
- 130) S. Turchini, D. Catone, N. Zema, G. Contini, T. Prospero, P. Decleva, M. Stener, F. Rondino, S. Piccirillo, K. C. Prince and M. Speranza  
 “Conformational Sensitivity in Photoelectron Circular Dichroism of 3-Methylcyclopentanone”  
 Chem. Phys. Chem. 14 (2013) 1723 – 1732.
- 131) Oscar Baseggio, Michele Romeo, Giovanna Fronzoni and Mauro Stener  
 “The near-edge X-ray-absorption fine-structure of O<sub>2</sub> chemisorbed on Ag(110) surface studied by density functional theory”  
 Surface Science, 616 (2013) 178-185.
- 132) D M P Holland, D A Shaw, S Coriani, M Stener and P Decleva  
 “A study of the valence shell electronic states of pyridazine by photoabsorption spectroscopy and time-dependent density functional theory calculations”  
 J. Phys. B 46 (2013) 175103 (15 pages).
- 133) GiovanniMaria Piccini, Remco W. A. Havenith, Ria Broer and Mauro Stener,

“Gold nanowires: a Time Dependent Density Functional assessment of plasmonic behaviour”

J. Phys. Chem. C, 117 (2013) 17196 – 17204.

134) D. Catone, S. Turchini, M. Stener, P. Decleva, G. Contini, T. Prosperi, V. Feyer, K. C. Prince and N. Zema

“Photoelectron Spectroscopy and Circular Dichroism of a Chiral Metal-organic Complex”

Rend. Fis. Acc. Lincei 24 (2013) 269-275.

135) R. Boll, D. Anielski, C. Bostedt, J. D. Bozek, L. Christensen, R. Coffee, S. De, P. Decleva, S. W. Epp, B. Erk, L. Foucar, F. Krasniqi, J. Küpper, A. Rouzeé, B. Rudek, A. Rudenko, S. Schorb, H. Stapelfeldt, M. Stener, S. Stern, S. Techert, S. Trippel, M. J. J. Vrakking, J. Ullrich, and D. Rolles

“Femtosecond photoelectron diffraction on laser-aligned molecules: Towards time-resolved imaging of molecular structure”

Phys. Rev. A, 88, (2013) 061402(R).

136) Hua, Weijie; Tian, Guangjun; Fronzoni, Giovanna; Li, Xin; Stener, Mauro; Luo, Yi

“Fe L-edge X-ray Absorption Spectra of Fe(II) Polypyridyl Spin Crossover Complexes from Time Dependent Density Functional Theory”

J. Phys. Chem. A, 117 (2013) 14075–14085.

137) M. Romeo, G. Balducci, M. Stener and G. Fronzoni,

“N1s and C1s NEXAFS Spectra of Model Systems for Pyridine on Si(100): a DFT Simulation”

J. Phys. Chem. C: 118 (2014) 1049 – 1061.

138) M. Stener, P. Decleva, T. Mizuno, H. Yoshida and A. Yagishita

“Off-resonance photoemission dynamics studied by recoil frame F1s and C1s photoelectron angular distributions of CH<sub>3</sub>F”

J. Chem. Phys., 140 (2014) 044305.

139) D. Rolles, R. Boll, M. Adolph, A. Aquila, C. Bostedt, J. D. Bozek, H. Chapman, R. Coffee, N. Coppola, P. Decleva, T. Delmas, S. W. Epp, B. Erk, F. Filsinger, L. Foucar, L. Gumprecht, A. Hömke, T. Gorkhover, L. Holmegaard, P. Johnsson, Ch. Kaiser, F. Krasniqi, K.-U. Kühnel, J. Maurer, M. Messerschmidt, R. Moshhammer, W. Quevedo, I. Rajkovic, A. Rouzeé, B. Rudek, I. Schlichting, C. Schmidt, S. Schorb, C. D. Schröter, J. Schulz, H. Stapelfeldt, M. Stener, S. Stern, S. Techert, J. Thøgersen, M. J. J. Vrakking, A. Rudenko, J. Küpper, J. Ullrich,

“Femtosecond X-Ray Photoelectron Diffraction on Gas-Phase Dibromobenzene Molecules”

J. Phys. B, 47 (2014) 124035.

140) Giovanni Barcaro, Luca Sementa, Alessandro Fortunelli and Mauro Stener,

"Optical properties of Ag nanoshells from TDDFT calculations"

J. Phys. Chem. C, 118 (2014) 12450.

141) Giovanna Fronzoni, Oscar Baseggio, Mauro Stener, Weijie Hua, Guangjun Tian, Yi Luo, Barbara Apicella, Michela Alf , Monica de Simone, Antti Kivim ki, Marcello Coreno

"Vibrationally-Resolved High-Resolution NEXAFS and XPS Spectra of Phenanthrene and Coronene"

J. Chem. Phys., 141 (2014) 044313.

142) David Crasto, Giovanni Barcaro, Mauro Stener, Luca Sementa, Alessandro Fortunelli, Amala Dass

"Au<sub>24</sub>(SAdm)<sub>16</sub> Nanomolecules: X-Ray Crystal Structure, Theoretical Analysis, Adaptability of Adamantane Ligands to form Au<sub>23</sub>(SAdm)<sub>16</sub>, Au<sub>25</sub>(SAdm)<sub>16</sub> and its Relation to Au<sub>25</sub>(SR)<sub>18</sub>"

J. Am. Chem. Soc., 136 (2014) 14933.

143) Rebecca Boll, Arnaud Rouz ee, Marcus Adolph, Denis Anielski, Andrew Aquila, Sadia Bari, C dric Bomme, Christoph Bostedt, John D. Bozek, Henry N. Chapman, Lauge Christensen, Ryan Coffee, Niccola Coppola, Sankar De, Piero Decleva, Sascha W. Epp, Benjamin Erk, Frank Filsinger, Lutz Foucar, Tais Gorkhover, Lars Gumprecht, Andr e H omke, Lotte Holmegaard, Per Johnsson, Jens Kienitz, Thomas Kirsipel, Faton Krasniqi, Kai-Uwe Kuhnel, Jochen Maurer, Marc Messerschmidt, Robert Moshhammer, Nele M uller, Benedikt Rudek, Evgeny Savelyev, Ilme Schlichting, Carlo Schmidt, Frank Scholz, Sebastian Schorb, Joachim Schulz, J rn Seltmann, Mauro Stener, Stephan Stern, Simone Techert, Jan Th gersen, Sebastian Trippel, Marc Vrakking, Henrik Stapelfeldt, Jochen K pper, Joachim Ullrich, Artem Rudenko and Daniel Rolles

"Imaging Molecular Structure through Femtosecond Photoelectron Diffraction on Spatially Aligned and Oriented Gas-Phase Molecules"

Faraday Discussions, 171 (2014) 57-80.

144) Giovanni Barcaro, Luca Sementa, Alessandro Fortunelli and Mauro Stener,

"Optical properties of Pt and Ag-Pt nanoclusters from TDDFT calculations: plasmon suppression by Pt poisoning"

J. Phys. Chem. C, 118 (2014) 28101–28108.

145) Giovanni Barcaro, Luca Sementa, Alessandro Fortunelli and Mauro Stener,

"Comment on "(Au–Ag)<sub>144</sub>(SR)<sub>60</sub> alloy nanomolecules" by C. Kumara and A. Dass, Nanoscale, 2011, 3, 3064"

Nanoscale, 7 (2015) 8166 – 8167.

146) D'Alessandro, Maira; Amadei, Andrea; Stener, Mauro; Aschi, Massimiliano,

"On the use of Essential Dynamics for the study of microstructures in liquids"

J. Comput. Chem. 36 (2015) 399-407.

- 147) R. Guillemin, P. Decleva, M. Stener, C. Bomme, T. Marin, L. Journal, T. Marchenko, R.K. Kushawaha, K. Jänkälä, N. Trcera, K.P. Bowen, D.W. Lindle, M.N. Piancastelli and M. Simon  
“Selecting core-hole localization or delocalization in CS<sub>2</sub> by photofragmentation dynamics”  
Nature Communications, 6 (2015) 6166.
- 148) Balducci, Gabriele; Romeo, Michele; Stener, Mauro; Fronzoni, Giovanna; Cvetko, Dean; Cossaro, Martina Dell’Angela, Gregor Kladnik, Latha Venkataraman, and Alberto Morgante, "Computational Study of Amino Mediated Molecular Interaction Evidenced in N1s NEXAFS: 1,4-Diaminobenzene on Au (111)."  
J. Phys. Chem. C, 119 (2015) 1988.
- 149) S. Coriani, M. Stener, P. Decleva, D.M.P. Holland, , A.W. Potts, L. Karlsson  
“A study of the valence shell electronic structure and photoionisation dynamics of s-triazine”  
Chem. Phys. 450 (2015) 115 – 124.
- 150) L. Sementa, G. Barcaro, A. Dass, M. Stener, and A. Fortunelli  
“Designing Ligand-Enhanced Optical Adsorption of Thiolated Gold NanoClusters”  
Chem. Comm. 51 (2015) 7935 – 7938.
- 151) Nimmala, Praneeth; Theivendran, Shevanuja; Barcaro, Giovanni; Sementa, Luca; Kumara, Chanaka; Jupally, Vijay; Aprà, Edoardo; Stener, Mauro; Fortunelli, Alessandro; Dass, Amala  
"Transformation of Au<sub>144</sub>(SCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Ph)<sub>60</sub> to Au<sub>133</sub>(SPh-tBu)<sub>52</sub> Nanomolecules: Theoretical and Experimental Study"  
J. Phys. Chem. Letters, 6 (2015) 2134.
- 152) Oscar Baseggio, Giovanna Fronzoni and Mauro Stener  
“A New Time Dependent Density Functional Algorithm for Large Systems and Plasmons in Metal Clusters”  
J. Chem. Phys., 143 (2015) 024106.
- 153) Giovanni Barcaro, Luca Sementa, Alessandro Fortunelli, and Mauro Stener  
“Optical Properties of NanoAlloys”  
Physical Chemistry Chemical Physics, 17 (2015) 27952 - 27967.
- 154) Alberto Baiardi, Marco Mendolicchio, Vincenzo Barone, Giovanna Fronzoni, Gustavo Adolfo Cardenas Jimenez, Mauro Stener, Cesare Grazioli, Monica de Simone, Marcello Coreno  
“Vibrationally resolved NEXAFS at C and N K-edges of pyridine, 2-fluoropyridine and 2,6-difluoropyridine: a combined experimental and theoretical assessment”

J. Chem. Phys, 143 (2015) 204102.

155) Dri, Carlo; Fronzoni, Giovanna; Balducci, Gabriele; Furlan, Sara; Stener, Mauro; Feng, Zhijing; Comelli, Giovanni; Castellarin-Cudia, Carla; Cvetko, Dean; Kladnik, Gregor; Verdini, Alberto; Floreano, Luca; Cossaro, Albano

"Chemistry of the Methylamine Termination at a Gold Surface: From Auto-Recognition to Condensation."

J. Phys. Chem. C, 120 (11) (2016) 6104-6115.

156) Dass, Amala; Jones, Tanya; Rambukwella, Milan; Crasto, David; Gagnon, Kevin; Sementa, Luca; De Vetta, Martina; Baseggio, Oscar; Aprà, Edoardo; Stener, Mauro; Fortunelli, Alessandro

"Crystal Structure and Theoretical Analysis of Green Gold  $\text{Au}_{30}(\text{S-tBu})_{18}$  Nanomolecules and their Relation to  $\text{Au}_{30}\text{S}(\text{S-tBu})_{18}$ "

J. Phys. Chem. C, 120 (11) (2016) 6256-6261.

157) Oscar Baseggio, Martina De Vetta, Giovanna Fronzoni and Mauro Stener, Luca Sementa, Alessandro Fortunelli and Arrigo Calzolari

"Photoabsorption of icosahedral noble metal clusters: an efficient TDDFT approach to large scale systems"

J. Phys. Chem. C, 2016, 120 (23), 12773–12782.

158) Oscar Baseggio, Martina De Vetta, Giovanna Fronzoni, Mauro Stener and Alessandro Fortunelli.

"A new Time Dependent Density Functional Method for molecular plasmonics: formalism, implementation and the  $\text{Au}_{144}(\text{SH})_{60}$  case study"

Int. J. Quantum Chem., 116 (2016) 1603 – 1611.

159) D.M.P. Holland, D.A. Shaw, M. Stener, P. Decleva and S. Coriani.

"A study of the valence shell electronic states of s-triazine by photoabsorption spectroscopy and ab initio calculations"

Chem. Phys., 477 (2016) 96–104.

160) Alessandro Fortunelli and Mauro Stener

"Optical absorption of  $(\text{Ag-Au})_{133}(\text{SCH}_3)_{52}$  bimetallic monolayer-protected clusters"

Progress in Natural Science: Materials International, 26 (2016) 467 – 476.

161) Baseggio, Oscar; Toffoli, Daniele; Fronzoni, Giovanna; Stener, Mauro; Sementa, Luca; Fortunelli, Alessandro

"Extension of the Time Dependent Density Functional complex polarizability algorithm to circular dichroism: implementation and applications to  $\text{Ag}_8$  and  $\text{Au}_{38}(\text{SC}_2\text{H}_4\text{C}_6\text{H}_5)_{24}$ "

J. Phys. Chem. C, 120 (2016) 24335 – 24345.

162) H. Sann, C. Schober, A. Mhamdi, F. Trinter, C. Müller, S.K. Semenov, M. Stener, M. Waitz, T. Bauer, R. Wallauer, C. Goihl, J. Titze, F. Afaneh, L. Ph. H.

Schmidt, M. Kunitski, H. Schmidt-Böcking, Ph. V. Demekhin, N. A. Cherepkov, M. S. Schöffler, T. Jahnke, and R. Dörner  
“Delocalization of a Vacancy across Two Neon Atoms Bound by the van der Waals Force”  
Phys. Rev. Lett. 117 (2016) 263001.

163) Fortunelli, Alessandro; Sementa, Luca; Thanthirige, Viraj; Jones, Tanya; Stener, Mauro; Gagnon, Kevin; Dass, Amala; Ramakrishna, Guda  
“Au<sub>21</sub>S(SAdm)<sub>15</sub>: An Anisotropic Gold Nanomolecule – Optical and Photoluminescence Spectroscopy, and First-Principles Theoretical Analysis”  
J. Phys. Chem. Lett., 8 (2017) 457 – 462.

164) D. Catone, S. Turchini, G. Contini, T. Prosperi, M. Stener, P. Decleva, and N. Zema  
“Photoelectron circular dichroism of isopropanolamine”  
Chem. Phys. 482 (2017) 294 – 302.

165) C. Grazioli, O. Baseggio, M. Stener, G. Fronzoni, M. de Simone, M. Coreno, A Guarnaccio, A. Santagata, M. D'Auria  
“Study of the electronic structure of short chain oligothiophenes”  
J. Chem. Phys., 146 (2017) 054303.

166) Rambukwella, Milan; Burrage, Shayna; Neubrandner, Marie; Baseggio, Oscar; Aprà, Edoardo; Stener, Mauro; Fortunelli, Alessandro; Dass, Amala  
“Au<sub>38</sub>(SPh)<sub>24</sub>: Au<sub>38</sub> Protected with Aromatic Thiolate Ligands”  
J. Phys. Chem. Lett., 8 (2017) 1530 – 1537.

167) Daniele Toffoli, Matus Stredansky, Zhijing Feng, Gabriele Balducci, Sara Furlan, Mauro Stener, Hande Ustunel, Dean Cvetko, Gregor Kladnik, Alberto Morgante, Alberto Verdini, Carlo Dri, Giovanni Comelli, Giovanna Fronzoni, Albano Cossaro  
“Electronic properties of the boroxine-gold interface: evidence of ultra-fast charge delocalization.”  
Chemical Science, 8 (2017) 3789 – 3798

168) Luca Sementa, Giovanni Barcaro, Oscar Baseggio, Martina De Vetta, Amala Dass, Edoardo Aprà, Mauro Stener, Alessandro Fortunelli  
“Ligand-Enhanced Optical Response of Gold Nanomolecules and its Fragment Projection Analysis: the Case of Au<sub>30</sub>(SR)<sub>18</sub>”  
J. Phys. Chem. C 121 (2017) 10832 – 10842.

169) Jones, Tanya; Sementa, Luca; Stener, Mauro; Gagnon, Kevin; Thanthirige, Viraj; Fortunelli, Alessandro, Ramakrishna, Guda; Dass, Amala;  
“Au<sub>21</sub>S(SAdm)<sub>15</sub>: Crystal Structure, Optical Spectroscopy and First-Principles Theoretical Analysis”  
J. Phys. Chem. C 121 (2017) 10865 – 10869.

- 170) Chongqi Yu, Wolfgang Harbich, Luca Sementa, Luca Ghiringhelli, Edoardo Aprà, Mauro Stener, Alessandro Fortunelli, and Harald Brune  
 "Intense fluorescence of Au<sub>20</sub>"  
 J. Chem. Phys. 147 (2017) 074301 (6 pages)
- 171) O. Baseggio, D. Toffoli, M. Stener, G. Fronzoni, M. de Simone, C. Grazioli, M. Coreno, A. Guarnaccio, A. Santagata, M. D'Auria  
 "S2p core level spectroscopy of short chain oligothiophenes"  
 J. Chem. Phys. 147 (2017) 244301 (13 pages)
- 172) Theivendran, Shevanuja; Chang, Le; Mukherjee, Aneek; Sementa, Luca; Stener, Mauro; Fortunelli, Alessandro; Dass, Amala  
 "Principles of Optical Spectroscopy of Aromatic Alloy Nanomolecules: Au<sub>36</sub>-  
<sub>x</sub>Ag<sub>x</sub>(SPh-tBu)<sub>24</sub>"  
 J. Phys. Chem. C 122, (2018) 4524-4531.
- 173) Naga Arjun Sakthivel, Mauro Stener, Luca Sementa, Alessandro Fortunelli, Ramakrishna Guda, Amala Dass  
 "Au<sub>279</sub>(SR)<sub>84</sub>: The Smallest Gold Thiolate Nanocrystal that is Metallic and the Birth of Plasmon."  
 J. Phys. Chem. Lett., 9 (2018) 1295–1300.
- 174) Milan Rambukwella, Le Chang, Anish Ravishanker, Alessandro Fortunelli, Mauro Stener, Amala Dass  
 "Au<sub>36</sub>(SePh)<sub>24</sub> Nanomolecules: Synthesis, Optical Spectroscopy and Theoretical Analysis"  
 Phys. Chem. Chem. Phys., 20 (2018) 13255.
- 175) Shota Tsuru, Takashi Fujikawa, Mauro Stener, Piero Decleva and Akira Yagishita  
 "Theoretical study of ultrafast x-ray photoelectron diffraction from molecules undergoing photodissociation"  
 J. Chem. Phys, 148 (2018) 124101.
- 176) Le Chang, Oscar Baseggio, Luca Sementa, Daojian Cheng, Giovanna Fronzoni, Daniele Toffoli, Edoardo Aprà, Mauro Stener and Alessandro Fortunelli

“Individual Component Map of Rotatory Strength and Rotatory Strength Density plots as analysis tools of circular dichroism spectra of complex systems”

Journal of Chemical Theory and Computation 14 (2018) 3703.

177) Oscar Baseggio, Martina De Vetta, Giovanna Fronzoni, Daniele Toffoli, Mauro Stener, Luca Sementa and Alessandro Fortunelli

“Time-Dependent Density-Functional Study of the Photoabsorption Spectrum of  $[\text{Au}_{25}(\text{SC}_2\text{H}_4\text{C}_6\text{H}_5)_{18}]$  anion: validation of the computational protocol”

Int. J. Quantum Chem. 118 (2018) e25769, DOI: 10.1002/qua.25769

178) J. Jesús Pelayo, Israel Valencia, A. Patricio García, Le Chang, Marta López, Daniele Toffoli, Mauro Stener, Alessandro Fortunelli and Ignacio L. Garzón “Chirality in bare and ligand-protected metal nanoclusters”

Advances in Physics X, 3 (2018) 1509727.

179) Toffoli, Daniele; Guarnaccio, Ambra; Grazioli, Cesare; Zhang, Teng; Johansson, Fredrik; de Simone, Monica; Coreno, Marcello; Santagata, Antonio; D'Auria, Maurizio; Puglia, Carla; Bernes, Elisa; Stener, Mauro; Fronzoni, Giovanna

"Electronic Structure Characterization of a Thiophene Benzo-Annulated Series of Common Building Blocks for Donor and Acceptor Compounds Studied by Gas Phase Photoelectron and Photoabsorption Synchrotron Spectroscopies"

J. Phys. Chem. A, 122 (2018) 8745.

180) Shinichirou Minemoto , Hiroyuki Shimada , Kazuma Komatsu, Wataru Komatsubara, Takuya Majima , Soichiro Miyake, Tomoya Mizuno, Shigeki Owada, Hirofumi Sakai, Tadashi Togashi, Makina Yabashi, Piero Decleva, Mauro Stener, Shota Tsuru and Akira Yagishita

“Time-resolved photoelectron angular distributions from nonadiabatically aligned  $\text{CO}_2$  molecules with SX-FEL at SACLA”

J. Phys. Commun. 2 (2018) 115015

181) Tiziano Dainese, Mikhail Agrachev, Sabrina Antonello, Denis Badocco, David M. Black, Alessandro Fortunelli, José A. Gascón, Mauro Stener, Alfonso Venzo, Robert L. Whetten and Flavio Maran

“Atomically Precise  $\text{Au}_{144}(\text{SR})_{60}$  Nanoclusters (R = Et, Pr) are Capped by 12 Distinct Ligand Types of 5-fold Equivalence and Display Gigantic Diastereotopic Effects”



Chemical Science, 9 (2018) 8796-8805.

182) A. Fortunelli and M. Stener

“Optical Properties of Metal Nanoclusters - Theory”

Encyclopedia of Interfacial Chemistry, 2018, 534–545

183) Daniele Toffoli, Oscar Baseggio, Giovanna Fronzoni, Mauro Stener, Alessandro Fortunelli and Luca Sementa

“Pd doping, conformational, and charge effects on the dichroic response of a monolayer protected Au<sub>38</sub>(SR)<sub>24</sub> nanocluster”

Phys.Chem.Chem.Phys.,2019,21, 3585—3596

DOI: 10.1039/c8cp04107e

184) Hironobu Fukuzawa, Syuhei Yamada, Yuta Sakakibara, TetsuyaTachibana, Yuta Ito, Tsukasa Takanashi, Toshiyuki Nishiyama, Tsukasa Sakai, Kiyonobu Nagaya, Norio Saito, Masaki Oura, Mauro Stener, Piero Decleva, and Kiyoshi Ueda.

"Probing gaseous molecular structure by molecular-frame photoelectron angular distributions".

J. Chem. Phys., 151 (2019) 104302.

doi: 10.1063/1.5115801

185) Marco Mendolicchio, Alberto Baiardi, Giovanna Fronzoni, Mauro Stener, Cesare Grazioli, Monica de Simone, and Vincenzo Barone.

"Theory meets experiment for unravelling the C1s X-ray photoelectron spectra of pyridine, 2-fluoropyridine, and 2,6-difluoropyridine".

J. Chem. Phys., 151 (2019) 124105

doi: 10.1063/1.5122310

186) Sofia Olobardi, Lorena Vega, Alessandro Fortunelli, Mauro Stener

Francesc Viñes, and Konstantin M. Neyman

“Optical properties and chemical ordering of Ag-Pt nanoalloys: a computational study”

J. Phys. Chem. C, 123 (2019) 25482–25491.

DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b07382

187) Naga Arjun Sakthivel, Mauro Stener, Luca Sementa, Marco Medves, Guda Ramakrishna, Alessandro Fortunelli, Allen G. Oliver and Amala Dass

“Crystal Structure of Au<sub>36-x</sub>Ag<sub>x</sub>(SPh-tBu)<sub>24</sub> Nanoalloy and the Role of Ag Doping in Excited State Coupling”

J. Phys. Chem. C, 123 (2019) 29484-29494.

DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b09060

188) Marco Medves, Luca Sementa, Daniele Toffoli, Giovanna Fronzoni, Alessandro Fortunelli\*, and Mauro Stener\*

“An Efficient Hybrid Scheme for Time Dependent Density Functional Theory”

J. Chem. Phys., 152 (2020) 184102 (1-10).

DOI: 10.1063/5.0005954

189) E. Bernes, G. Fronzoni, M. Stener, A. Guarnaccio, T. Zhang, C. Grazioli, F. Johansson, M. Coreno, M. de Simone, C. Puglia, D. Toffoli\*

“2p and P 2p Core Level Spectroscopy of PPT Ambipolar Material and Its Building Block Moieties”

J. Phys. Chem. C, 124 (2020) 14510–14520.

<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c03973>

190) Krishnadas, Kumaranchira; Sementa, Luca; Medeves, Marco; Fortunelli, Alessandro; Stener, Mauro\*; Fürstenberg, Alexandre; Longhi, Giovanna; Burgi, Thomas\*

“Chiral functionalization of an atomically precise noble metal cluster: Insights into the origin of chirality and photoluminescence”

ACS Nano 14 (2020) 9687–9700

191) Naga Arjun Sakthivel, Masoud Shabaninezhad, Luca Sementa, Bokwon Yoon, Mauro Stener, Robert L. Whetten, Guda Ramakrishna, Alessandro Fortunelli, Uzi Landman and Amala Dass

“The Missing Link: Au<sub>191</sub>(SPh-tBu)<sub>66</sub> Janus Nanoparticle with Molecular and Bulk-metal-like Properties”

J. Am. Chem. Soc. 142 (2020) 15799–15814

## COMUNICAZIONI A CONGRESSI DEL DR. M. STENER

- 1) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Theoretical Studies of Photoexcitation and Photoionization by  $X\alpha$  Hartree-Fock-Slater Approach in Atoms and Molecules", NATO ASI on "Density Functional Theory", Il Ciocco, Castelveccchio Pascoli (Lucca), 15 - 27 agosto 1993.
- 2) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Theoretical Studies of Photoexcitation and Photoionization by  $X\alpha$  Hartree-Fock-Slater Approach in Atoms and Molecules", "5th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics", Villa Olmo, Como 13-16 settembre 1993.
- 3) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Stieltjes Imaging photoionization cross sections by large basis set LCAO density functional calculation", Il convegno nazionale di informatica chimica, CINECA, Casalecchio di Reno, Bologna, 16-18 febbraio 1994.
- 4) P. Decleva, A. Lisini, M. Stener and G. Fronzoni, "Theoretical Study of inner shell absorption spectra in transition metal compounds", Secondo convegno SILS (Societa' Italiana Luce di Sincrotrone), Universita' di Roma "Tor Vergata", Roma 20-21 giugno 1994.
- 5) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Stieltjes Imaging photoionization cross sections by large basis set LCAO density functional calculation", Secondo convegno SILS (Societa' Italiana Luce di Sincrotrone), Universita' di Roma "Tor Vergata", Roma 20-21 giugno 1994.
- 6) P. Decleva, A. Lisini, M. Stener and G. Fronzoni, "Theoretical Study of inner shell absorption spectra in transition metal compounds", Secondo convegno INCM (consorzio interuniversitario nazionale per la chimica dei materiali), Firenze 13-15 febbraio 1995.
- 7) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Cross sections calculations by the LDA and TDLDA approaches", ICES-6, 6th International Conference on Electron Spectroscopy, Roma 19-23 giugno 1995.
- 8) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Cross sections calculations by the LDA and TDLDA approaches", XVIII congresso nazionale societa' chimica italiana, Milano 28 agosto- 1 settembre 1995.
- 9) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Density functional and ab-initio calculations of core excitation spectra", "6th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics", Parigi, 29 agosto - 1 settembre 1995.
- 10) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Density functional - time dependent local density approximation calculations of autoionization resonances in noble gases", "6th

International Conference On the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics", Parigi, 29 agosto - 1 settembre 1995.

11) O. D. Häberlen, S. C. Chung, M. Stener and N. Rösch, "Dai cluster allo stato solido. Studio di una serie di cluster di oro  $Au_n$ ,  $n = 6 \dots 147$  con il metodo del funzionale densità relativistico", "XXVIII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana", Pisa, 10 - 14 febbraio 1997.

12) M. Stener, G. De Alti, G. Fronzoni and P. Decleva, "TDLDA calculations of photoionization cross-section and asymmetry parameter profiles of alkaline-earth atoms", "7th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics", Vienna, 2 - 6 settembre 1997.

13) P. Decleva and M. Stener, "Molecular photoionization cross-section profiles and asymmetry parameter from B-spline LDA calculations", "7th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics", Vienna, 2 - 6 settembre 1997.

14) M. Stener, "Theoretical Methods of Molecular Photoionization", "Chemistry Meeting - Universities of Ljubljana, Trieste and Zagreb", Trieste, 1 - 2 luglio 1998.

15) M. Stener, M. Venuti e P. Decleva, "Calcolo di orbitali molecolari dello spettro continuo con un metodo funzionale densità in una base di B-splines", "XXIX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana", Comunicazione Orale, Taormina (ME), 5 - 9 ottobre 1998.

16) M. Stener, G. Fronzoni, S. Furlan and P. Decleva, "Photoionization by TD-DFT and exchange correlation potential with correct asymptotic behaviour", "8th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Roma, 6 - 10 settembre 1999.

17) P. Decleva, G. Fronzoni, M. Stener and G. De Alti, "Photoionization of  $C_{60}$  and  $M@C_{60}$  by large scale LDA continuum calculations", "8th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Roma, 6 - 10 settembre 1999.

18) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva, "Studio teorico degli spettri NEXAFS Cl 1s e 2p di  $Cl_2$ , ClF e  $ClF_3$ ", "XXV Congresso Internazionale dei Chimici Teorici di Espressione Latina", Napoli, 13 - 18 settembre 1999.

19) M. Stener, G. Fronzoni, S. Furlan and P. Decleva, "Photoionization by TD-DFT and exchange correlation potential with correct asymptotic behaviour", "XXX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana", Firenze, 26 settembre - 1 ottobre 1999.

- 20) P. Decleva, G. Fronzoni, M. Stener and G. De Alti, "Photoionization of  $C_{60}$  and  $M@C_{60}$  by large scale LDA continuum calculations", "XXX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Societa' Chimica Italiana", Firenze, 26 settembre – 1 ottobre 1999.
- 21) M. Stener and P. Decleva, "Time – Dependent Density Functional calculations of molecular photoionization cross section:  $N_2$  and  $PH_3$ ", "Xth International Congress of Quantum Chemistry", Mentone (Francia) 5-10 giugno 2000.
- 22) P. Decleva, P. Colavita, G. Fronzoni and M. Stener, "DFT calculations of photoionization of  $C_{60}$  and  $M@C_{60}$ ", "Xth International Congress of Quantum Chemistry", Mentone (Francia) 5-10 giugno 2000.
- 23) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva, "Theoretical study of photoionization processes in organometallic compounds", "XXXI Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana", Padova, 19-23 giugno 2001.
- 24) M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva, "Calculations of photoemission profiles of  $C_{60}$  and endohedral compounds", "XXXI Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana", Padova, 19-23 giugno 2001.
- 25) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva, "Theoretical study of photoionization processes in organometallic compounds", "Thirteenth International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (VUV-XIII)", Trieste, 23-27 luglio 2001.
- 26) M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva, "Calculations of photoemission profiles of  $C_{60}$  and endohedral compounds", "Thirteenth International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (VUV-XIII)", Trieste, 23-27 luglio 2001.
- 27) M. Stener, G. Fronzoni, and P. Decleva, "Time Dependent Density Functional B-spline calculation of molecular photoionization", "9th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Madrid, 10 - 14 settembre 2001.
- 28) P. Decleva, G. Fronzoni, and M. Stener, "Valence and core photoemission in  $M@C_{60}$  (  $M = Be, Mg, Ca$  )", "19th International Conference on X-ray and Inner-Shell Processes", Università di Roma "La Sapienza", 24 – 28 giugno 2002.
- 29) M. Stener, G. Fronzoni, and P. Decleva, "Photoionization of oriented molecules: a time dependent density functional approach", "19th International Conference on X-ray and Inner-Shell Processes", Università di Roma "La Sapienza", 24 – 28 giugno 2002.
- 30) M. Stener and G. Fronzoni, "Time Dependent Density Functional B-spline calculation of molecular photoionization", "Fourth Congress of the International

Society for Theoretical Chemical Physics”, Marly-le-Roi (Parigi) , Francia, 9 – 16 luglio 2002.

31) G. Fronzoni and M. Stener, “TD-DFT calculations of core excitations in large systems”, “Fourth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics”, Marly-le-Roi (Parigi) , Francia, 9 – 16 luglio 2002.

32) Corrado Crotti, Teresa Celestino, Erica Farnetti, Mauro Stener and Stefano Fontana, “Synchrotron radiation photoemission study of tungsten carbonyl complexes”, XXX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica della Societa' Chimica Italiana, Modena 15 – 19 settembre 2002.

33) Tsutomu Watanabe and Mauro Stener, “Penning Ionization of Axial Symmetric Molecules by Optically Allowed Excited Atoms”, The Vth Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, Nara-ken New Public Hall, Nara, Japan 2-5 October, 2002.

34) M. Stener, “Descrizione teorica della fotoemissione e del fotoassorbimento di atomi e molecole”, "incontro scientifico COFIN", Universita' di Siena 25 – 26 ottobre 2002, comunicazione orale.

35) M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva, “Descrizione della fotoionizzazione molecolare a livello DFT con funzioni di base B-spline”, “XXI Congresso della Societa' Chimica Italiana”, Torino, 22-27 giugno 2003.

36) J. Schiessling, M. Stener, L. Kjeldgaard, T. Balasubramanian, P. Decleva, J. Nordgren and P. A. Brühwiler, “Angular Effects in Photoelectron Spectra of Solid and Monolayer C<sub>60</sub>”, ICESS-9 (International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure), Uppsala (Svezia), 30 giugno – 4 luglio 2003.

37) M. Alagia, G. Contini, P. Decleva, G. Fronzoni, T. Prosperi, R. Richter, M. Stener, S. Stranges, S. Turchini and N. Zema, “Photoionization of chiral, radical and transient free molecules at ELETTRA”, ICESS-9 (International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure), Uppsala (Svezia), 30 giugno – 4 luglio 2003.

38) M. Stener, G. Fronzoni and A. Reduce, “Studio TDDFT delle eccitazioni di core in modelli molecolari della solfito ossidasi ”, GICC2003, V Edizione del Congresso del Gruppo Italiano di Chimica Computazionale, Certosa di Pontignano, Siena, 18-19 dicembre 2003, comunicazione orale.

39) M. Stener, “Time dependent density functional theory of core electron excitations”, DEMOCRITOS INFORMAL SEMINAR, SISSA, Trieste, 12 febbraio 2004.

40) J. Schiessling, M. Stener , T. Balasubramanian , L. Kjeldgaard, P. Decleva, J. Nordgren and P. A. Brühwiler, “Identification of molecular orbital components of C60

on Al(110)", "205<sup>th</sup> Meeting of The Electrochemical Society", 9–14 May 2004, San Antonio, Texas, USA, comunicazione orale.

41) S. Turchini, N. Zema, G. Contini, G. Alberti, M. Alagia, S. Stranges, G. Fronzoni, M. Stener, P. Decleva and T. Prosperi

"Circular Dichroism in the Angular Distribution of Photoelectrons from Chiral Molecules: Experiment and Theory on R(+) and S(-) Methyl-oxiranes"

INFMEETING 2004, Convegno nazionale per la Ricerca Interdisciplinare in Fisica della materia (CNR-INFM), Genova 8-10 giugno 2004, poster.

42) M. Stener, R. De Francesco, G. Fronzoni

"Eccitazioni di core in ossidi metallici: studio TDDFT con modelli a cluster"

Divisione di Chimica Fisica - Società Chimica Italiana, XXXIII Congresso Nazionale, 21 - 25 Giugno 2004, Napoli - Complesso Universitario di Monte S. Angelo, poster.

43) M. Stener,

"Photoionization of large polyatomic molecules and clusters (Theory)"

3<sup>rd</sup> meeting of the COST working group D26/0002/02: "B-spline basis sets in laser-molecule interactions: ionisation and active control of chemical reactions", Università di Trieste, Italy, 1 and 2 October 2004, comunicazione orale.

44) M. Stener

"Density Functional Theory of Photoionization"

Nottingham University (England), 3 novembre 2004, seminario su invito.

45) M. Stener

"Quantum chemistry approaches to predict ion fragmentation in the gas phase",

Shimadzu Research Laboratory (Europe)LTD., Manchester, England, 5 novembre 2004, seminario su invito.

46) M. Stener, R. De Francesco, G. Fronzoni

"Eccitazioni di core in ossidi metallici: studio TDDFT con modelli a cluster"

III Scuola Nazionale in Simulazioni Computazionali Multiscala Applicate alle Scienze dei Materiali, 14-18 febbraio 2005, Modena - Università di Modena e Reggio Emilia (poster)

47) M. Stener

"Molecular Photoionization: a density functional approach with applications to circular dichroism in photoelectron angular distribution"

International Networking for Young Scientists: "Chirality in Molecular Physics"

British Council, Paris, France, 7-11 March 2005 (invited talk)

48) S. Coriani, P. Decleva, G. Fronzoni, M. Stener, R. De Francesco, D. Di Tommaso e D. Toffoli,

"Struttura elettronica e spettri di eccitazione di cluster finiti"

Workshop presentazione Centro Interdipartimentale per le Scienze Computazionali (CISC)

Universita' di Trieste, 15 giugno 2005 (talk)

49) M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva

"Time Dependent Density Functional Theory for molecular photoionization with non-iterative algorithm and multicenter B-spline basis set: implementation and applications",

"11th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Geneve, 11 - 15 September 2005, (poster).

50) G. Fronzoni, R. De Francesco, M. Stener and M. Causà,

"Time Dependent Density Functional Theory of X-ray absorption spectroscopy of metal oxides",

"11th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Geneve, 11 - 15 September 2005, (poster).

51) D. Di Tommaso, M. Stener and P. Decleva

" Calculation of the Circular Dichroism in the photoelectron Angular Distribution with the LCAO B-spline DFT method"

"11th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Geneve, 11 - 15 September 2005, (poster).

52) M. Stener e G. Fronzoni

"Time Dependent DFT per lo studio di sistemi estesi" (talk)

Presentazione SeaSandS 19-20 dicembre 2005, Dip. di Chimica Università Federico II, Complesso Universitario Monte Sant'Angelo, Napoli.

53) G. Fronzoni, R. De Francesco, M. Stener and M. Causa'

"Time Dependent Density Functional Theory of X-ray absorption spectroscopy of metal oxides"

XIII Elettra Users' Meeting, Satellite Workshop "Computer Simulations of Surface and Interface Phenomena", Trieste, 15-16 December 2005 (poster)

54) G. Fronzoni, R. De Francesco, M. Stener and M. Causa'

"X-Ray absorption spectroscopy of alkaline-earth and transition metal oxides by Time Dependent Density Functional Theory"

DFTEM2006 - International Conference on Density Functional Theory (DFT) and Transmission Electron Microscopy (TEM), Vienna, April 21 - 23, 2006

55) G. Fronzoni, R. De Francesco e M. Stener

"Calcoli TDDFT di eccitazioni di core in ossidi metallici e molecole adsorbite su superfici"

GICC2006, VI Convegno nazionale del Gruppo Interdivisionale di Chimica Computazionale, Isola di San Servolo, Venezia 18-21 dicembre 2006 (comunicazione orale).



- 56) M. Stener, A. Nardelli, R. De Francesco and G. Fronzoni  
"Valence electron excitations in gold clusters: a scalar relativistic TDDFT study"  
GICC2006, VI Convegno nazionale del Gruppo Interdivisionale di Chimica Computazionale, Isola di San Servolo, Venezia 18-21 dicembre 2006 (poster).
- 57) M. Stener, M. Causà, R. De Francesco, G. Fronzoni, A. Nardelli  
"Core and valence TDDFT studies on bulk, nanostructured materials and surface adsorbed molecules"  
INSTM2007, VI Convegno nazionale sulla Scienza e tecnologia dei materiali, Università degli Studi di Perugia, Aula Magna, 12-15 Giugno 2007 (poster).
- 58) M. Stener  
"Applications of TDDFT to material science: core electron excitations of bulk materials and optical spectra of gold nanoparticles"  
NNL (National Nanotechnology Laboratories) of CNR-INFM, Università degli Studi di Lecce, 20 giugno 2007, seminario su invito.
- 59) T. Teramoto, J. Adachi, K. Hosaka, M. Yamazaki, K. Yamanouchi, N. A. Cherepkov, M. Stener, P. Decleva and A. Yagishita  
"New approach for a complete experiment: C1s photoionization in CO<sub>2</sub> molecules"  
XXV ICPEAC, Freiburg, 25-31 July 2007
- 60) A. Yagishita, T. Teramoto, J. Adachi, K. Hosaka, M. Yamazaki, K. Yamanouchi, N. Cherepkov, M. Stener, P. Decleva  
"New approach for a complete experiment: C1s photoionization of CO<sub>2</sub> and CS<sub>2</sub> molecules"  
XV VUV, Berlin, 29 July - 3 August 2007.
- 61) M. Stener, P. Decleva and G. Fronzoni  
"Response effects in photoemission of transition metal compounds by TDDFT"  
The first Meeting of the COST Action CM0702: Chemistry with Ultrashort Pulses and Free-Electron Lasers: Looking for Control Strategies Through "Exact" Computations (CUSPFEL) Bordeaux (France) 16 - 17 October 2008.
- 62) M. Stener, G. Fronzoni, A. Nardelli and R. De Francesco  
"Photoabsorption of gold nanoparticles: a TDDFT analysis by cluster model"  
Theoretical Tools for In-silico Spectroscopy (TheTIS)  
Pisa, 18-20 February 2009, Oral contribution
- 63) M. Stener, P. Decleva, M. Yamazaki, J. Adachi, T. Teramoto and A. Yagishita  
"Photoelectron angular distribution from core ionization of a single oriented NO<sub>2</sub> molecule"  
COST action CM0702, International Workshop on ATOMIC PHYSICS: "Ultra-fast dynamics in finite atomic and molecular systems probed with novel light sources", Max

Planck Institute for the Physics of Complex Systems (MPIPKS), Dresden, 23 - 25 november 2009, poster.

64) M. Stener

"A TDDFT study on the dichroism in the photoelectron angular distribution from a chiral transition metal compound"

Gordon Research Conference: "Photoions, Photoionization & Photodetachment" January 31 - February 5, 2010, Hotel Galvez, Galveston (Texas - USA)

Invited talk.

65) M. Stener

"Resonances in chiral photoemission from a transition metal compound"

COST ACTION CM0702, 1st Meeting of the WG2, Università di Trieste, 22-24 April 2010, comunicazione orale.

66) D. Catone, S. Turchini, T. Prosperi, N. Zema, G. Contini, V. Feyer, M. Beccari, K. C. Prince, M. Stener, P. Decleva

"Gas phase circular dichroism in the photoelectron spectroscopy of dissymmetric metal-organic complex: Co(III)-tris-(acetylacetonate)."

XVIII Meeting of the Italian Society for Synchrotron Radiation (SILS 2010), 24-26 June 2010, Padova, Italy, poster.

67) M. Stener

"The TDDFT approach for the description of core electron excitations in bulk materials and large clusters"

Actinet I3 Workshop: Coupling XAS and Theoretical Chemistry for Heavy Atoms. Avignon (F), 23-24 June 2010, invited talk.

68) D. Catone, S. Turchini, T. Prosperi, N. Zema, G. Contini, V. Feyer, M. Beccari, K. C. Prince, M. Stener, P. Decleva

"GAS PHASE CIRCULAR DICHROISM IN THE PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY OF ASYMMETRIC METAL-ORGANIC COMPLEX: Co(III)-tris-(acetylacetonate)."

10th European Conference on Atom, Molecules and Photons (ECAMP 10), Salamanca, Spain, July 4-9, 2010, poster.

69) A. Kivimäki, L. Avaldi, P. Bolognesi, M. Coreno, P. O'Keeffe, V. Feyer, J. Alvarez Ruiz, M. Stankiewicz, M. Stener, G. Fronzoni, P. Decleva

"Photoabsorption, photoionization and photoelectron – Auger electron coincidence studies of the SF<sub>6</sub> molecule at and above the S 2p edge"

37th International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics (VUVX2010), University of British Columbia, Vancouver, BC, Canada, 11-16 July 2010, poster.

70) Mauro Stener, Nicola Durante and Alessandro Fortunelli

"TDDFT computational study of optical photoabsorption in  $Au_n$  and  $Au_nAg_m$  nanoclusters"

European Cost Action MP0903: "Nanoalloys as advanced materials: from structure to properties and applications" Joint Working Group Meetings, Faculty of Chemistry, Universitat de Barcelona, April 14-16, 2011, invited talk.

71) Mauro Stener

"TDDFT and DFT approaches for core electron excitations: molecules, bulk materials and large clusters"

CECAM workshop on: "X-ray Spectroscopy : Recent Advances in Modelling and New Challenges" July 13, 2011 to July 15, 2011, CECAM-ETHZ, Zurich, Switzerland, keynote lecture.

72) R. De Francesco, M. Stener, G. Fronzoni

"X-Ray absorption spectroscopy at the  $L_{2,3}$  edges of transition metal oxides by relativistic time dependent density functional calculations"

XXIV Congresso Nazionale della Societa' Chimica Italiana  
Lecce, 11 – 16 September 2011, poster.

73) M. Romeo, R. De Francesco, M. Stener, G. Balducci, G. Fronzoni

"C K-edge NEXAFS Spectra of Model Systems for  $C_2H_4$  on Si(100): a DFT Simulation"

XXIV Congresso Nazionale della Societa' Chimica Italiana  
Lecce, 11 – 16 September 2011, poster.

74) R. De Francesco, G. Fronzoni, M. Stener

"Theoretical study of near edge x-ray absorption fine structure spectra of metal phthalocyanines at C and N Kedges"

XXIV Congresso Nazionale della Societa' Chimica Italiana  
Lecce, 11 – 16 September 2011, poster.

75) Mauro Stener

"Core electron excitations in molecules, large clusters and bulk materials: a TDDFT approach"

Workshop: "Holistic Computational Spectroscopy" CMST Action CM1002  
CODECS: CONvergent Distributed Environment for Computational Spectroscopy,  
Pisa, Scuola Normale Superiore, 16 – 18 novembre 2011, invited talk.

76) M. Stener , D. Catone, P. Decleva, G. Contini, N. Zema, T. Prosperi, V. Feyer, K. C. Prince, S. Turchini

"Resonant Circular Dichroism of Chiral Metal-Organic complex"

Primo Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Societa' Chimica Italiana, Pisa, Area della Ricerca del CNR, 22 - 23 febbraio 2012, poster.

77) M. Stener, Piero Decleva, Tomoya Mizuno, Jun-ichi Adachi, Misato Kazama, Hiroaki Yoshida, and Akira Yagishita

“C1s and F1s photoelectron angular distribution from oriented CH<sub>3</sub>F molecules: a combined theoretical TDDFT and experimental study”

MPS2012, International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces, August 27 - September 1, 2012, Berlin (Germany), invited talk.

78) M. Stener

"Recent advances in the theoretical description of photoelectron angular distribution"

Scuola Normale Superiore, Pisa, December, 20<sup>th</sup> 2012

Invited seminar

79) Oscar Baseggio, Mauro Stener, Michele Romeo and Giovanna Fronzoni

“THE NEAR-EDGE X-RAY-ABSORPTION FINE-STRUCTURE OF O<sub>2</sub> CHEMISORBED ON Ag(110) SURFACE STUDIED BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY”

Secondo Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, Padova, 20 - 22 febbraio 2013, poster.

80) M. Romeo, G. Balducci, M. Stener, G. Fronzoni

NITROGEN AND CARBON K-EDGE NEXAFS SPECTRA OF MODEL SYSTEMS FOR C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>N ON Si(100) : A DFT SIMULATION

M. Romeo, G. Balducci, M. Stener, G. Fronzoni

Secondo Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, Padova, 20 - 22 febbraio 2013, poster.

81) M. Stener

“TDDFT computational study of optical photoabsorption in Ag<sub>n</sub>Pt<sub>m</sub> nanoclusters”

European Cost Action MP0903: "Nanoalloys as advanced materials: from structure to properties and applications" Workshop - Working groups 2 and 4, Domaine de Valpré, Lyon, France, 7 – 9 April 2013, invited talk.

82) M. Stener

“Metal clusters: electronic structure and photoabsorption TDDFT calculations”

Scuola di Dottorato in Scienze Molecolari, Università degli Studi di Padova, May 2<sup>nd</sup> 2013, invited seminar.

83) O. Baseggio and M. Stener

“A New Valence Photoabsorption TDDFT Algorithm for Large Systems”

15th International Conference on Density Functional Theory and its Applications, September 9 – 13, 2013, Durham, UK, poster.

84) M. Stener

“Playing with TDDFT algorithms: from photoionization of small molecules to photoabsorption of large systems”

Invited seminar at the Computer Chemistry Center and the Chair of Theoretical Chemistry, Department Chemie und Pharmazie, Friedrich-Alexander-Universitaet Erlangen-Nuernberg,  
December 9<sup>th</sup> 2013, Erlangen, Germany.

85) M. Stener and O. Baseggio

“TDDFT for large systems”

Invited seminar at the ADF Developers Workshop, SCM, Vrije Universiteit Amsterdam,  
February 18-20, 2014, Amsterdam, The Netherland.

86) O. Baseggio, G. Fronzoni and M. Stener

“A New Valence Photoabsorption TDDFT Algorithm for Large Systems”

Talk, Winter Modeling 2014,  
March 13-14, 2014, Modena, Italy.

87) M. Stener, G. Barcaro, L. Sementa and A. Fortunelli

“TDDFT computational study of optical photoabsorption in thiolate-protected Ag<sub>n</sub>Au<sub>m</sub> nanoclusters”

European Cost Action MP0903: "COST Action MP0903 Final Conference" Hotel Regina Elena, Santa Margherita Ligure (Genova, Italy), 5 – 9 April 2014, invited talk.

88) M. Stener

‘TDDFT and DFT approaches for NEXAFS: free molecules, bulk materials and adsorbed molecules’

COST MP1306 EUSpec action first Whole Action Meeting, September 15-17, 2014  
Catholic University of Louvain, Louvain la Neuve, Belgium, invited talk.

89) M. Stener, G. Fronzoni, O. Baseggio, G. Cardenas, Y. Luo, W. Hua, M. De Simone, M. Coreno, B. Apicella, M. Alfè, A. Kivimäki, A. Baiardi and V. Barone

“Vibrationally resolved high-resolution NEXAFS and XPS spectra of polycyclic aromatic hydrocarbons and heterocyclic compounds”

Talk, Winter Modeling 2014 Special Edition, Scuola Normale Superiore,  
December 1-2, 2014, Pisa, Italy.

90) Oscar Baseggio, Giovanna Fronzoni and Mauro Stener

“A New Time Dependent Density Functional Algorithm for Large Systems and Plasmons in Metal Clusters”

Invited talk, 15<sup>th</sup> International Conference on Quantum Chemistry (15ICQC) , satellite meeting on Advanced Modelling of Nano Materials (AMNM) Hefei, China, 14-17 June 2015.

91) Mauro Stener, Oscar Baseggio and Giovanna Fronzoni

“A New Time Dependent Density Functional Algorithm for Plasmons in Metal Clusters”

CECAM workshop: “Computational plasmonics: an ab initio and multiscale perspective”, 2-4 November 2015, CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland, contributed talk.

92) A. Fortunelli, L. Sementa, G. Barcaro, A. Dass, E. Aprà, M. De Vetta, O. Baseggio, G. Fronzoni and M. Stener

“Designing ligand-enhanced optical absorption of thiolated gold nanoclusters: new results and a new TDDFT method”

Terzo Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, Roma, 14 - 16 dicembre 2015, poster.

93) M. Stener

" A New TDDFT Algorithm for Plasmons in Metal Clusters "

Invited seminar at the Theoretical Chemistry, Zernike Institute for Advanced Materials, University of Groningen, Groningen, The Netherlands.

1 febbraio 2016

94) M. Stener

"A New TDDFT Algorithm for Plasmons in Metal Clusters"

Invited seminar at the Department of Theoretical Chemistry and Biology, Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden

19 maggio 2016

95) M. Stener and A. Fortunelli

" A New TDDFT Method for Optical Design of Metal Clusters"

Oral contribution at the 6th EuCheMS Chemistry Congress, Sevilla (Spain) 11 – 15 September 2016.

96) Mauro Stener, Paolo Ronchese, Giovanna Fronzoni, Daniele Toffoli, Alessandro Fortunelli, Luca Sementa, Giovanni Barcaro

“A computational study on the optical interaction between BODIPY and the  $[\text{Au}_{25}(\text{SCH}_3)_{18}]$  cluster: long-range interactions”

Quarto Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, Pisa, Scuola Normale Superiore, 3 - 5 ottobre 2016, poster.

97) G. Fronzoni, D. Toffoli, M. Stener, H. Ustunel, A. Cossaro, C. Dri, Zhijing Feng

“Core-level spectroscopic study of derivatives of phenyl-boronic acid on Au(111) surface: an experimental and theoretical investigation”

Quarto Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, Pisa, Scuola Normale Superiore, 3 - 5 ottobre 2016, poster.

98) Mauro Stener, Oscar Baseggio, Giovanna Fronzoni, Alessandro Fortunelli, Stan van Gisbergen, Erik van Lenthe

“A New Efficient Time Dependent Density Functional Algorithm for Large Systems: Theory, Implementation and Plasmonics Applications”

17th International Conference On Density Functional Theory and its Applications, August 21-25, 2017, Tällberg, Sweden

Oral Contribution.

99) Mauro Stener

“A New TDDFT Algorithm for Plasmons in Metal Clusters”

Invited seminar: Chimie Théorique et Modélisation, Institut de Recherche de Chimie Paris, Chimie ParisTech, 19 settembre 2017.

100) Mauro Stener

“A New Efficient Time Dependent Density Functional Algorithm for Large Systems: Theory, Implementation and Plasmonics Applications”

International Center for Theoretical Physics, Trieste (Italy), Condensed Matter and Statistical Physics invited seminar, January 25th 2018

101) Mauro Stener and Oscar Baseggio

“The POLTDDFT module in ADF: new analysis tools for chiro-optical spectra in the TDDFT framework”

ADF Developer Meeting 2018, Vrije Universiteit Amsterdam, 26-29 March 2018, invited talk.

102) Mauro Stener<sup>1,\*</sup>, Daniele Toffoli<sup>1</sup>, Marco Medves<sup>1</sup>, Andrea Russi<sup>1</sup>, Alessandro Fortunelli<sup>2</sup>, Luca Sementa<sup>2</sup>

“Origin of Circular Dichroism in noble metal clusters by TDDFT »

Workshop MOST2020, CNR-IOM, Trieste, 20-21 January 2020.

103) M. Stener

“Theoretical Methods and Studies of the Optical Properties of Nanoalloys”

Second International School on NanoAlloys (ISNA-2)

Pisa, January 22nd 2020

104) M. Stener

“Theoretical Studies of the Optical and Photo-catalytic Properties of Nanoalloys “

Second International School on NanoAlloys (ISNA-2)

Pisa, January 23rd 2020

Trieste, 28 novembre 2020

Mauro Stener