

CURRICULUM VITAE
Rita Magri

CONTENUTO

DATI ANAGRAFICI	3
SITUAZIONE PROFESSIONALE CORRENTE	3
FORMAZIONE	5
ESPERIENZA PROFESSIONALE PRECEDENTE ...	6
ATTRIBUZIONE DI BORSE E NOMINE	6
ATTIVITÀ DI RICERCA	8
SEMINARI E INVITED TALKS	11
ATTIVITÀ DIDATTICA	13
PUBBLICAZIONI	17
PARTECIPAZIONE A CONFERENZE	25
CONTRIBUTI SCIENTIFICI	30

CURRICULUM VITAE

DATI ANAGRAFICI

Cognome: **Magri**

Nome: **Rita**

Nata il 02/05/1958 a Mirandola, Modena

Cittadinanza italiana

Livello di istruzione e professione dei genitori: terza elementare, operai.

Stato civile : Divorziata, 1 figlio nato il 01/12/1976 durante l'ultimo anno di Liceo Classico.

Indirizzo: Via del Salice n. 7, 41030 Bomporto, Modena

Tel. : +39.059.2055285(lavoro), +39.339.1848933 (cellulare)

SITUAZIONE PROFESSIONALE CORRENTE

Posizione : Ricercatore Universitario dal 01/12 /1992

Istituzione : Dipartimento di Fisica, Università di Modena e Reggio Emilia

Indirizzo: Via Campi 213/A, 41100 Modena

Tel. +39.059.2055285

Fax +39.059.2055235

e-mail: rita.magri@unimo.it

Sito internet http://www.s3.infm.it/antispam/scheda_new.php?ID_PERS=47,
http://www.fisica.unimo.it/uni_fisica/scheda.php?macro=info&sub=personale&nome=magri

Temi generali della Ricerca : Studio delle proprietà strutturali, elettroniche e ottiche dei materiali (in particolare super-reticoli, leghe, interfacce, superfici e nanostrutture) con metodi atomistici (ab-initio e semiempirici) e multi-scala. Studio degli effetti dei processi di crescita e delle interazioni multicorpi sulle proprietà dei materiali.

Insegnamento

- Elettromagnetismo I per studenti di Fisica al primo anno della Laurea Triennale
- Fisica 2 per studenti di Matematica al terzo anno della Laurea Triennale
- Incaricata per l'anno corrente 2008-2009 del corso di Teoria della Materia Condensata (parte prima) alla Laurea Magistrale.
- Membro di varie commissioni d'esame.

Altre Attività

- Membro del consiglio della scuola di dottorato, del consiglio di Facoltà
- Tutore di assegnista di ricerca e borsisti
- Tutore di studenti di dottorato per conto del Prof. Ossicini.
- Membro di commissioni di valutazione per posti di ruolo di ricercatore universitario (in commissione due volte all'Univerista' di Tor Vergata per due posti da ricercatore), per posizioni di assegnista e borsista, per posti di dottorato.
- Referee per varie riviste scientifiche
- Valutatore e Reviewer di Progetti Europei (INTAS, VI Programma Quadro).
- Membro del Program Committee della Conferenza Internazionale NGS (Narrow Gap Semiconductors) che si tiene ogni due anni.

FORMAZIONE

Maturità Classica, luglio 1977, Voto 58/60
Liceo Classico “G. Pico”, Mirandola, Modena
Iscrizione al primo anno corso di Laurea in Fisica presso l’Università di Modena nell’ottobre 1979.

Laurea in Fisica
Voto 110/110 con Lode il 24 Luglio 1985.
All’ Università di Modena e Reggio Emilia
Titolo della tesi : Funzione dielettrica dell’Hamiltoniana di Anderson
Relatore : Prof. Carlo Calandra

Dottorato in Fisica (1986-1989)
Titolo conferito a Roma nel settembre 1990
Corso seguito presso il Dipartimento di Fisica dell’Università di Modena
Titolo della tesi: Proprietà elettroniche e strutturali di superreticoli di semiconduttori III-V
Tutor : Prof. Carlo Calandra

FORMAZIONE COMPLEMENTARE - Corsi di specializzazione

Fisica :

1986 “*Physics of surfaces, interfaces, superlattices*”
(G.N.S.M.-C.I.S.M, Cannitello di Villa San Giovanni (RC), Italie 14-26/09)

1987 “*Highlights on spectroscopies of semiconductors and insulators*”
(G.N.S.M.- C.I.S.M, Castro-Marina (Lecce), Italie, 31/08-12/09)

1988 “*Photoemission and Adsorption Spectroscopy of Solids and Interfaces with Synchrotron Radiation*”
(Internation School Enrico Fermi, Varenna, Italie, 12-22/07)

Calcolo scientifico:

1985 “Programming in Fortran” (CICAIA, Modena)
1986 “Office Automation” (CICAIA, Modena)
1995 “Introduction on parallel Computing on Cray T3D” (CINECA, Bologna)
1995 “ Scientific visualization with AVS ” (CICAIA, Modena)
1997 “ VI Summer School on Parallel Computing ” (CINECA, Bologna)

Lingue

Inglese (fluente)
Francese (conoscenza di base)

ESPERIENZA PROFESSIONALE PRECEDENTE

Tre anni di esperienza in Laboratori esteri (USA e Canada) di cui:

- **Dal 1 novembre 1989 al 30 aprile 1991**

Postdoctoral research associate al Solar Energy Research Institute, SERI, (ora National Renewable Energy Laboratory, NREL), Colorado, USA nel gruppo di ricerca del Dr. Alex Zunger.

Al SERI ho studiato la stabilità termodinamica delle leghe pseudobinarie e di diverse strutture con ordine a lungo raggio e l'applicazione di metodologie, quali lo sviluppo in clusters e il concetto delle strutture speciali quasi-random alla descrizione di diverse proprietà elettroniche (quali l'energia totale, l'energia di Madelung, il band gap) di leghe e super-reticoli a corto periodo.

- **From 1 december 1991 to 30 november 1992**

Postdoctoral fellow alla Simon Fraser University, Burnaby, congiuntamente alla University of British Columbia, Vancouver, Canada, nel gruppo di ricerca del Prof. J. Dahn

Il progetto di lavoro ha riguardato il calcolo del potenziale chimico di Li intercalato in grafite drogata con boro per batterie ricaricabili

ATTRIBUZIONE DI BORSE E NOMINE

Borse

1987 Borsa della Honeywell Bull

1985-1987 Borsa della Sorin Biomedica S.p.A. per lo studio di materiali di carbonio bio-compatibile per valvole cardiache tramite metodi di spettroscopia elettronica di superficie (XPS, Photon and Electron Auger Spectroscopy, EELS). L'attività si è svolta al Laboratorio SESAMO presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Modena sotto la supervisione del Prof. Giampiero Ottaviani.

Nomine

2002 Qualification pour exercer la fonction de Professeur des Universités (section 28) – riconfermata nell'anno 2006, Francia

1995 Ricercatore Universitario confermato

1992 Ricercatore Universitario

Membro del consiglio di Tutorato in Fisica (anni 1994,1995,1996,1997) con funzioni di segretario. Nell'ambito di questa nomina ho organizzato le riunioni del tutorato, conferenze di Dipartimento, presentazioni del Corso di Laurea in Fisica ad In-formazione.

Membro della Giunta di Dipartimento Anni 1994-1997

ATTIVITÀ DI RICERCA

L'attività di ricerca si basa principalmente sullo studio teorico e computazionale delle proprietà strutturali, elettroniche e ottiche dei materiali semiconduttori di interesse per le applicazioni optoelettroniche avanzate (lasers, sensori, celle solari, emettitori a singolo fotone, qubits).

Questa attività ha dato luogo **alla pubblicazione di circa 60 articoli (di cui alcune come autore unico) su riviste scientifiche di carattere internazionale**, ad innumerevoli partecipazioni a congressi e a conferenze internazionali, **anche ad invito. Due di questi articoli sono stati valutati ECCELLENTI nella valutazione CIVR 2001-2003.**

Inoltre, negli anni si sono formate e consolidate **varie collaborazioni scientifiche** con gruppi di ricerca nazionali e internazionali che hanno dato luogo a visite di alcuni mesi presso altri laboratori. La maggior parte dell'attività di ricerca si è comunque svolta presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Modena e Reggio Emilia anche in collaborazione col locale centro CNR-S3 "*Nanostructures and Biosystems at Surfaces*".

La ricerca **svolta è stata finanziata tramite alcuni progetti.**

Questi aspetti dell'attività di ricerca sono descritti in maggiore dettaglio qui sotto.

VISITE DI LUNGA DURATA IN LABORATORI STRANIERI (finanziate sempre dall'istituzione straniera)

Novembre 2005-Febbraio 2006 - **Tre mesi in qualità senior scientist** al National Renewable Energy Lab., NREL, a Golden, Colorado, USA, finanziati dal DOE (Department of Energy, USA).

2003 – **Un mese** al Walter Schottky Institut, Monaco, Germania, nel gruppo del Prof. Vogl. Finanziato dal WSI.

2002-2003 – **Sei mesi come poste rouge del CNRS** presso il gruppo del Dr. Paul Voisin al LPN-CNRS, Marcoussis, Francia.

2000 – **Quattro mesi come visiting professor** presso il gruppo del Dr. Paul Voisin all'Ecole Normale Supérieure di Parigi, Francia, finanziato dal CNRS.

1999 – **Tre mesi come senior scientist** al National Renewable Energy Lab. NREL a Golden, Colorado, Stati Uniti, finanziati dal DOE (Department of Energy, USA).

1995 – Un mese al Dipartimento di Fisica all'Università di São Paulo, Brasile, finanziato dal CNPQ-CNR.

COMPETENZE TECNICHE

Programmazione in Fortran sia seriale che parallela per diverse piattaforme computazionali. Conoscenza del linguaggio C, C++, HTML, XML.

Conoscenza di molti algoritmi numerici per la soluzione di problemi di stato solido: calcolo degli autovalori e autofunzioni di hamiltoniane, Minimi di funzioni di molte variabili, operazioni matriciali su matrici enormi con metodi iterativi, simulazioni Monte Carlo.

Uso del software per la visualizzazione dei dati e per la grafica: AVS, Sigmaplot, origin, xmgrace, matlab, cerius.

Uso di vari codici esistenti per calcoli ab-initio della struttura elettronica: Espresso, Abinit, più vari codici scritti in casa, utilizzo e sviluppo di tre diversi codici per la generazione di pseudopotenziali atomici.

Conoscenza e sviluppo di codici per i calcoli atomistici semiempirici: ESCAN (empirical pseudopotential method), TIGHT-BINDING, codici per la parametrizzazione, VFF (valence force field).

Conoscenza e sviluppo di codici per il calcolo delle proprietà ottiche e di quasi-particella basati sia su approcci ab-initio che su approcci semiempirici.

PROGETTI

Come Partecipante

Ho partecipato a numerosi progetti nazionali ed internazionali.

Ho partecipato a progetti MIUR COFIN nel 1997, 1999, 2002, 2005. Altri progetti a cui ho partecipato sono: Progetto EC ESPRIT "Emission of Light in Silicon, il Progetto Nazionale CNR "Development and characterization of silicon based LED", il Progetto Nazionale MURST "From the ideal to the real surfaces", il Progetto EC-INCO "Silicon Based Light Emitting Diodes", il Progetto EC-ESPRIT "Silicon Modules for Integrating Light Engineering", il Progetto Nazionale MURST "Low-dimensional systems: optoelectronic properties", il Progetto INFN-PRA "Radiation Amplification by Stimulated Emission in Silicon Nanostructures".

Dal 2004 contribuisco al Working Group 1 – GW Method in European Network “*Electronic Structure Calculation of Solid and Surfaces*” Coordinatore Internazionale: **A. Rubio**, San Sebastian, Spain.

Come coordinatore e/o responsabile locale

Ho coordinato come responsabile di unità i seguenti progetti:

- **un progetto Europeo INTAS nel 2000-2002.** Titolo: "*Polarization Resolved Spectroscopy of nanostructures*", Altri Partecipanti : CNRS Paris, Univ. Wuerzburg, Ioffe Institut St. Petersburg, Institut de Solid State Physics Chernogolovka, Institut de Physique Kiev. Finanziamento Euro 21000.

- **Nel 2002-2003** Responsabile locale del **Progetto Bilaterale "Galileo"** Italia-France, dal Titolo: "*Project and Study of Semiconductor Materials for non Linear Optics and Infrared Spectroscopy Applications*", Partecipanti : LPN-CNRS e Dipartimento di Fisica-Università di Modena. Finanziamento 10000 euro.

- **Negli anni dal 1995 al 2007** Coordinatore dei **progetti annuali di supercalcolo** ad alte prestazioni presso il CINECA (Bologna) per circa 40000 ore di CPU all'anno.

- **un grant internazionale EOARD** (European Office of Aerospace Research and Development), nel 2002-2004, dal Titolo: "*Empirical Pseudopotential Modeling of Antimonide based III-V Nanostructures*".

Finanziamento totale: dollari 20000

- **un progetto Nazionale PRIN-2005 (anni 2006-2007) approvato per cofinanziamento dal MIUR dal titolo: "*Spatially controlled nucleation of quantum dots for single photon emitters*"**
Modello B: "*Simulazioni atomistiche della crescita tramite Molecular Beam Epitaxy e degli spettri ottici di punti quantici semiconduttori*".

Altri gruppi partecipanti: Università Tor Vergata di Roma, Università di Firenze.

Finanziamento dell'unità: euro 65602.

- **2006-2007 CNR-CNISM Progetto Innesco** "Will be silicon the lasing technology of this century?" Euro 120000.

Ho coordinato **come responsabile nazionale** i seguenti progetti:

- **un progetto Nazionale INFN PAIS 2003-2004 CELEX dal Titolo :** "Computing Electronic Excitation and Optical Spectra of Surfaces, Clusters and Interfaces from First-Principles", Altri gruppi partecipanti: Università Tor Vergata di Roma, Università Statale di Milano. Finanziamento totale: euro 58095,46.

PROGETTI PRINCIPALI IN CORSO

- Ho vinto il bando per il conferimento di un Assegno annuale per la collaborazione ad attività di ricerca cofinanziato dalla Fondazione Cassa di Risparmio di Modena, dalla Fondazione Cassa di Risparmio di Reggio Emilia Pietro Manodori e dal Gruppo Bancario Capitalia. Titolo: "Progettazione di nanosensori basati su semiconduttori nanostrutturati" di cui sono il tutor.

Come **COORDINATRICE NAZIONALE**

- **un progetto Nazionale PRIN-2007 (anni 2007-2008) approvato per cofinanziamento dal MIUR dal titolo: "*Bridging the gap between experiment and theory: towards the control of growth and properties of semiconductor nanostructures*".** Partners: Università di Tor Vergata, CNR.

Finanziamento totale: 146100,00 Euro.

PROGETTI SOTTOMESSI E IN CORSO DI VALUTAZIONE

- Progetto FIRB Italia-Cina in qualità di **Coordinatrice Nazionale**

- Progetto Europeo FP7-NMP-2008-SMALL-2 in qualità di **Coordinatrice Internazionale**. Acronimo NANOSINT. Il Progetto ha già superato lo stage 1 di valutazione.
- Progetto di ricerca a carattere internazionale bandito dalla Fondazione Cassa di Risparmio di Modena. Partecipazione **come partner**. Responsabile del progetto: Elena Degoli del DISMI, Università' di Modena e Reggio Emilia.

AFFILIAZIONI

Membro dell'American Physical Society dal 1990.

Associato A1 al CNISM (Consorzio Nazionale Interuniversitario Per Le Scienze Fisiche della Materia).

Associato al centro di ricerca CNR-S3.

COLLABORAZIONI LOCALI, NAZIONALI E INTERNAZIONALI

Locali

Prof. Stefano Ossicini

Prof. C. M. Bertoni

In passato ho collaborato anche con il Prof. Carlo Calandra e la Prof. Franca Manghi.

Nazionali

Collaboro attivamente coi gruppi di:

Rodolfo del Sole – Università di Roma 2 a Tor Vergata

Adalberto Balzarotti - Università di Roma 2 a Tor Vergata

Anna Vinattieri e Massimo Gurioli – Università di Firenze

Lucia Sorba – Scuola Normale Superiore, Pisa e TASC

Lorenzo Pavesi – Università di Trento

Domenico Ninno – Università di Napoli Federico II

Giovanni Onida - Università' di Milano

Internazionali

Dr. Alex Zunger, National Renewable Energy Lab., Golden, Colorado, USA

Prof. Peter Kratzer, Universität Duisburg – Essen, Germania

Prof. Lixin He, University of Science and Technology of China, Hefei, Cina

Prof. Lucia Reining, Ecole Polytechnique, Paliseau, Francia

Dr. Paul Voisin, LPN-CNRS, Marcoussis, Francia

Dr. Sergey Ivanov and Dr. Kosta Moiseev, IOFFE Institute, St. Petersburg, Federazione Russa.

Prof. Aristides Zdetis, Patras, Grecia

Prof F. Bechstedt, Jena, Germania

Promotrice di una Convenzione di collaborazione scientifica tra l'Ateneo di Modena e Reggio Emilia e l' University of Science and Technology of China nel campo delle nanoscienze e quantum computing.

SEMINARI E INVITED TALKS

INVITED TALKS

R. Magri, "*Electronic properties of III-V Pseudobinary Compounds and Alloys*", 1st Workshop on Vectorial and Parallel Computing of Electronic Properties of Solids, Taormina, Italy, May 29-31, 1991.

R. Magri, "*Cluster Expansion of Semiconductor Alloy Band Gaps*", CECAM Workshop on Theoretical Predictions of Alloy Phase Stability, Lyon, France, June 10-14, 1996.

R. Magri, "*Theory of the optical properties of segregated (InAs)/(GaSb) superlattices*", Third Workshop on the Fabrication, Characterization, and Applications of 6.1 Å III-V Semiconductors, July 3 to August 2, 2001, Snowbird, Utah, USA

R. Magri, "*Theory of optical properties of 6.1 Å III-V superlattices: the role of the interfaces*" PCSI-30: 30th Conference on the Physics and Chemistry of Semiconductor Interfaces, January 19-23, 2003, Salt Lake City, Utah, USA.

R. Magri, "*Predicting energy gaps in InGaAsSb Superlattice and Alloy Systems using the Empirical Pseudopotential Method*", 11th International Conference on Narrow Gap Semiconductors, June 16-20, 2003, Buffalo, New York, USA.

R. Magri, "*Surface and confinement effects on the optical and structural properties of silicon nanocrystals*". International Symposium on Optical Science and Technology, 48th SPIE's Annual Meeting, San Diego, California, USA (August 3-8, 2003).

R. Magri, "*Role of surface passivation and doping in silicocn nanocrystals*", ICCSME (International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering), Chania, Creta, Grecia (27 oct.-1 Nov 2006).

SEMINARI

Sono stata invitata a tenere seminari in varie occasioni. Tra queste:

Rita Magri
Cluster expansion methods for the electronic properties of semiconductor pseudbinary alloys
Simon Fraser University,
Burnaby, BC, Canada, december 1991.

Rita Magri

Ab-initio investigation of the polarization dependence of the optical absorption in no-common atom superlattices
Ecole Normale Superieure, Paris, France, october 1998.

Rita Magri

Optical properties of 6.1 Å III-V (001) Superlattices: The role of Interfaces

January 27, 2003

IEEE/LEOS Lecture at the Center for High Technology Materials (CHTM), University of New Mexico, Albuquerque, NM, USA

Rita Magri

Electronic and Optical properties of InAs/GaSb (001) Superlattices: the effect of interfacial segregation on the interband transition energies.

February 27, 2003

LPN, CNRS, Marcoussis, France

Rita Magri

Electronic and Optical properties of 6.1 Å III-V (001) Superlattices:
the role of Interfaces

February 19, 2003

CEA, Saclay, France

Rita Magri

Electronic and Optical Properties of no-common-atom InAs/GaSb (001) superlattices: the role of interfaces

February 3, 2003

LPMC, Ecole Normale Superieure, Paris, France

Rita Magri

Optical Properties of no-common-atom III-V (001) superlattices: the role of interfaces

December 17, 2002

Walter Schottky Institute Technische Universitaet Muenchen , Germany

Rita Magri

Predicting Energy Gaps in InGaAsSb Superlattice and Alloy Systems

November 18, 2003

Scuola Normale Superiore, Pisa, Italy

ATTIVITÀ DIDATTICA

Dal 1995 insegno a titolo gratuito Corsi Fondamentali per studenti ai primi anni dei corsi di Laurea.

Con totalità del corso si intende la teoria, le esercitazioni, preparazione di compitini, compiti scritti e gli esami.

ANNO 2008-2009

Teoria della Materia Condensata (Modulo sulle Proprietà Ottiche) (per studenti del primo anno della Laurea Specialistica in Fisica)

ANNO 2007-2008

1) Elettromagnetismo I (per studenti del primo anno della Laurea Triennale in Fisica)

2) Fisica 2 (per studenti del terzo anno della Laurea Triennale in Matematica)

Carico didattico (9 crediti) teoria più esercizi senza esercitatore

Esame scritto e orale

ANNO 2006-2007

1) Elettromagnetismo I (per studenti del primo anno della Laurea Triennale in Fisica)

2) Fisica 2 (per studenti del terzo anno della Laurea Triennale in Matematica)

Carico didattico (6 crediti) teoria più esercizi senza esercitatore

Esame scritto e orale

ANNO 2005-2006

1) Elettromagnetismo I (per studenti del primo anno della Laurea Triennale in Fisica)

2) Fisica 2 (per studenti del terzo anno della Laurea Triennale in Matematica)

Carico didattico (6 crediti) Esame scritto e orale

ANNI PRECEDENTI

AA 04-05

1) **Elettromagnetismo I** : totalità del corso (80 h) (studenti primo anno di Fisica)

2) **Fisica 2** : totalità del corso (70 h) (studenti terzo anno di Matematica)

Oscillazioni e Onde: totalità del corso (50 h) (studenti secondo anno di Fisica)

AA 03-04

1) **Fisica 2**: totalità del corso (70 h) (studenti terzo anno di Matematica)

2) **Oscillazioni e Onde** : totalità del corso (50 h) (studenti secondo anno di Fisica)

AA 02-03

1) **Fisica 2**: totalità del corso (70 h)

VECCHIO ORDINAMENTO

AA 01-02

1) **Istituzioni di Fisica Teorica** (80 h) (studenti terzo anno di Fisica vecchio ordinamento)

AA 00-01

- 1) **Fisica Generale 2**: totalità del corso (100 h) (studenti del secondo anno di Geologia)
- 2) **Fisica Generale 2** : totalità del corso (100 h) (studenti del secondo anno di Ingegneria)

AA 99-00

- 1) **Fisica Generale 2**: totalità del corso (100 h) (studenti del secondo anno di Geologia)

AA 98-99

- 1) **Fisica Generale 2**: totalità del corso (100 h) (studenti del secondo anno di Geologia)

AA 97-98

- 1) **Fisica Generale 2**: totalità del corso (100 h) (studenti del secondo anno di Geologia)

AA 96-97

- 1) **Fisica Generale 2**: totalità del corso (100 h) (studenti del secondo anno di Geologia)

AA 95-96

- 1) **Struttura della Materia**: Esercizi e complementi di Termodinamica (30 h)
- 2) **Esercizi di Fisica Generale II** per il corso di laurea in Fisica (annuale)

AA 94-95

- 1) **Struttura della Materia**: Esercizi e complementi di Termodinamica (30 h)

AA 93-94

- 1) **Struttura della Materia**: Esercizi e complementi di Termodinamica (30 h)

Inoltre ho contribuito alla formazione di nuovi ricercatori e studenti

Come tutor responsabile:

- **Dr. Olivia Pulci** (Progetto Celex)
- **Dr. Marcello Rosini** (Assegnista Prin 2005-2007)
- **Dr. Ivan Marri** (Borsista Prin 2005-2007)
- **Dr.ssa Maria Clelia Righi** (fondi EOARD)
- **Dr. Elena Degoli** sulle tecniche di calcolo ab-initio basate sugli pseudopotenziali con il relativo calcolo delle energie totali e ottimizzazione strutturale.

Ho contribuito alla formazione di dottorandi e laureandi:

TESI DI DOTTORATO

In corso : Roberto Guerra, Amato Michele

05-07 Federico Iori

3.5 Eleonora Luppi

00-02 Marcello Luppi

TESI DI LAUREA

03-04 Federico Iori

99-00 Chiara Ghidoni

99-00 Chiara Papotti

TUTORATO

Membro del consiglio di Tutorato in Fisica (anni 1994,1995,1996,1997) con funzioni di segretario. Nell'ambito di questa nomina ho organizzato le riunioni del tutorato, conferenze di Dipartimento, presentazioni del Corso di Laurea in Fisica all'esposizione In-formazione.

PUBBLICAZIONI

RIVISTE (con referee)

2009

1. Roberto Guerra, Ivan Marri, **Rita Magri**, Layla Martin-Samos, Olivia Pulci, Elena Degoli, and Stefano Ossicini, “Silicon Nanocrystallites in a SiO₂ matrix: Role of disorder and size”, *Phys. Rev. B* **79**, 155320 (2009).
2. G. Biasiol, **R. Magri**, S. Heun, A. Locatelli, T. O. Mendes, and L. Sorba, “Surface compositional mapping of self-assembled InAs/GaAs quantum rings”, *J. of Crystal Growth* **311**, 1764 (2009).
3. Marcello Rosini, Maria Clelia Righi, Peter Kratzer, and Rita Magri, “Indium surface diffusion on InAs (2x4) reconstructed wetting layers on GaAs(001)”, *Phys. Rev. B* **79**, 075302 (2009).

2008

4. Marcello Rosini, **Rita Magri**, and Peter Kratzer, “Adsorption of Indium on an InAs wetting layer deposited on the GaAs(001) surface”, *Phys. Rev. B* **77**, 165323 (2008).
5. Paulo Piquini, Alex Zunger, and **Rita Magri**, “Pseudopotential calculations of band gaps and band edges of short-period (InAs)_n/(GaSb)_m superlattices with different substrates, layer orientations, and interfacial bonds”, *Phys. Rev. B* **77**, 115314 (2008).
6. Ming Gong, Kaimin Duan, Chuan-Feng Li, **Rita Magri**, Gustavo A. Narvaez, and Lixin He, “Electronic structure of self-assembled InAs/InP quantum dots: Comparison with self-assembled InAs/GaAs quantum dots”, *Phys. Rev. B* **77**, 045326 (2008).
7. S. Ossicini, O. Bisi, Elena Degoli, I. Marri, F. Iori, E. Luppi, **R. Magri**, R. Poli, G. Cantele, D. Ninno, F. Trani, M. Marsili, O. Pulci, M. Gatti, K. Gaal-Nagy, A. Incze, G. Onida, V. Olevano, “First Principle Study of Silicon Nanocrystals: Structural and Electronic Properties, Absorption, Emission and Doping”, *J. of Nanoscience and Nanotechnology* **8**, 479–492 (2008).

2007

8. **R. Magri**, E. Degoli, F. Iori, E. Luppi, O. Pulci, S. Ossicini, “Role of surface passivation and doping in silicon nanocrystals”, *Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering* **7**, 1–14 (2007).
9. S. Ossicini, E. Degoli, F. Iori, O. Pulci, G. Cantele, **R. Magri**, O. Bisi, F. Trani, and D. Ninno, “Doping in silicon nanocrystals”, *Surface Science* **601** (13), 2724-2729 (2007).
10. F. Iori, S. Ossicini, E. Degoli, E. Luppi, R. Poli, **R. Magri**, G. Cantele, F. Trani, and D. Ninno, “Doping in silicon nanostructures”, *Physica Status Solidi A* **204** (5), 1312-1317 (2007).

11. Federico Iori, Elena Degoli, **Rita Magri**, Ivan Marri, G. Cantele, D. Ninno, F. Trani, O. Pulci, and Stefano Ossicini, “Engineering silicon nanocrystals: Theoretical study of the effect of codoping with boron and phosphorus”, *Phys. Rev. B* **76**, 085302 (2007).

12. Eleonora Luppi, Federico Iori, **Rita Magri**, Olivia Pulci, Stefano Ossicini, Elena Degoli, and Valerio Olevano, “Excitons in silicon nanocrystallites: The nature of luminescence”, *Phys. Rev. B* **75**, 033303 (2007).

13. **Rita Magri**, F. Iori, E. Degoli, O. Pulci, and S. Ossicini, “Codoping goes Nano: Structural and Optical Properties of Boron and Phosphorus Codoped Silicon Nanocrystals”, *AIP Conf. Proc.* **963**, 359 (2007).

2006

14. F. Iori, E. Degoli, E. Luppi, **R. Magri**, I. Marri, G. Cantele, D. Ninno, F. Trani, S. Ossicini, “Doping in silicon nanocrystals: An ab initio study of the structural, electronic and optical properties”, *Journal of Luminescence* **121**, 335-339 (2006).

15. S. Ossicini, F. Iori, E. Degoli, E. Luppi, **R. Magri**, R. Poli, G. Cantele, F. Trani, D. Ninno, “Understanding Doping in Silicon Nanostructures”, *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* **12**, 1585 (2006).

16. M. C. Righi, **R. Magri**, C. M. Bertoni, “Study of arsenic for antimony exchange at the Sb-stabilized GaSb(001) surface”, *APPLIED SURFACE SCIENCE*, **252**,5271 (2006).

2005

17. G. Cantele, E. Degoli, E. Luppi, **R. Magri**, D. Ninno, O. Bisi, S. Ossicini, and G. Iadonisi, “Electronic, structural and optical properties of hydrogenated silicon nanocrystals: the role of the excited states”, *Physica Status Solidi (c)* **2**, 3263-3267 (2005).

18. **R. Magri**, A. Zunger, and H. Kroemer, “Evolution of the band-gap and band-edge energies of the lattice-matched GaInAsSb/GaSb and GaInAsSb/InAs alloys as a function of composition”, *Journal of Applied Physics* **98**, 043701 (2005).

19. G. Cantele, E. Degoli, E. Luppi, **R. Magri**, D. Ninno, G. Iadonisi, and S. Ossicini, “First-principle study of n- and p- doped silicon nanoclusters”, *Phys. Rev. B* **72**, 113303 (2005).

20. M. C. Righi, **Rita Magri**, and C. M. Bertoni, “First-principles study of Sb-stabilized GaSb(001) surface reconstructions”, *Phys. Rev. B* **71**, 075323 (2005).

21. E. Degoli, S. Ossicini, G. Cantele, E. Luppi, **R. Magri**, D. Ninno, and O. Bisi, “Formation Energies of Silicon Nanocrystals: Role of Dimension and Passivation”, *Physica Status Solidi (c)* **9**, 3354 (2005).

22. S. Ossicini, F. Iori, E. Degoli, E. Luppi, **R. Magri**, G. Cantele, F. Trani, and D. Ninno, "Simultaneously B- and P-doped Silicon Nanoclusters: Formation Energies and Electronic Properties", *Applied Physics Letters* **87**, 173120-(1-3) (2005).
23. E. Luppi, E. Degoli, G. Cantele, S. Ossicini, **R. Magri**, D. Ninno, O. Bisi, O. Pulci, G. Onida, M. Gatti, A. Incze, and R. Del Sole, "The electronic and optical properties of silicon nanoclusters: absorption and emission", *Optical Materials* **27**, 1008 (2005).
24. E. Degoli, G. Cantele, E. Luppi, **R. Magri**, S. Ossicini, D. Ninno, O. Bisi, G. Onida, M. Gatti, A. Incze, O. Pulci, and R. Del Sole, "Ab-initio calculations of the electronic properties of silicon nanocrystals: absorption, emission, stokes shift" , "*AIP Conf. Proc.*" , **772** , 859-860 , (2005).
25. M. C. Righi, **R. Magri**, and C. M. Bertoni, "First-Principles Study of GaSb(001) surface reconstructions" , "*AIP Conf. Proc.*" , **772** , 375 , (2005)
26. **R. Magri**, A. Zunger, and H. Kroemer, "Evolution of the band gaps and band edges of quaternary $Ga_{1-y}In_yAs_xSb_{1-x}/InAs$ alloys as a function of composition" , "*AIP Conf. Proc.*" , **772** , 375 , (2005).
27. S. Ossicini, F. Iori, E. Degoli, E. Luppi, **R. Magri**, G. Cantele, F. Trani, and D. Ninno, "P and B single- and co-doped Silicon Nanocrystals: Formation and Activation Energies, Electronic and Optical Properties" , "*IEEE Conference Proceedings "Group IV Photonics"*" , 60-62 , (2005)
28. S. Ossicini, O. Bisi, G. Cantele, E. Degoli, R. Del Sole, M. Gatti, A. Incze, F. Iori, E. Luppi, **R. Magri**, D. Ninno, G. Onida, and O. Pulci, "Ab-initio Calculations Of The Electronic Properties of Hydrogenated and Oxidized Silicon Nanocrystals: Ground and Excited States" , "*Proceedings del XVII Congresso AIV-17*" , 277-282 , (2005)

2004

29. E. Degoli, G. Cantele, E. Luppi, **R. Magri**, D. Ninno, O. Bisi, and S. Ossicini, "Ab Initio Structural and Electroni Properties of Hydrogenated Silicon Nanoclusters in their Ground and Excited State", *Phys. Rev. B* **69**, 155411 (2004).
30. J.-M. Jancu, A. Vasanelli, **R. Magri**, and P. Voisin, "Giant birefringence in zinc-blende-based artificial semiconductors", *Phys. Rev. B* **69**, 241303(R) (2004).
31. S. Ossicini, E. Degoli, G. Cantele, E. Luppi, **R. Magri**, D. Ninno, and O. Bisi, "Formation energies of siliconnanocrystals: role of dimension and passivation" , "*Porous semiconductor science and technology - Materials of the 4th International Conf. 2004*" , ed. by L. T. Canham, A. Nassiopoulou, and V. Parkhoutik, P1-26 , (2004)

32. G. Cantele, E. Degoli, E. Luppi, **R. Magri**, D. Ninno, O. Bisi, S. Ossicini, and G. Iadonisi, "Structural, electronic, and optical properties of silicon nanoclusters: the role of the size and surface passivation" , "*Porous semiconductor science and technology - Materials of the 4th International Conf. 2004*" , ed. by L. T. Canham, A. Nassiopoulos, V. Parkhoutik, 0-51 , (2004)

2003

33. E. Degoli, S. Ossicini, M. Luppi, E. Luppi, **R. Magri**, G. Cantele, D. Ninno, and N. Iadonisi, "Electronic and optical properties of silicon nanocrystals: structural effects", *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **770**, I1.9 (2003).

34. N. Daldosso, M. Luppi, G. Dalba, L. Pavesi, F. Rocca, F. Priolo, G. Franzò, F. Iacona, E. Degoli, **R. Magri**, and S. Ossicini, "Experimental and theoretical joint study on the electronic and structural properties of silicon nanocrystals embedded in SiO₂: active role of the interface region", *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **770**, I6.1 (2003).

35. **R. Magri** and A. Zunger, "Predicting Interband Transition Energies for InAs/GaSb Superlattices using the Empirical Pseudopotential Method", *Phys. Rev. B* **68**, 155329 (2003).

36. N. Daldosso, M. Luppi, S. Ossicini, E. Degoli, **R. Magri**, G. Dalba, P. Fornasini, R. Grisenti, F. Rocca, L. Pavesi, S. Boninelli, F. Priolo, C. Spinella, and F. Iacona, "Role of the interface region on the optoelectronic properties of silicon nanocrystals embedded in SiO₂", *Phys. Rev. B* **68**, 85327 (2003).

37. S. Ossicini, **R. Magri**, E. Degoli, M. Luppi, and E. Luppi, "Surface and confinement effects on the optical and structural properties of silicon nanocrystals", *Spie Proc. Series* **5222**, (2003).

38. **R. Magri** and A. Zunger, "Theory of Optical properties of 6.1 Å III-V Superlattices: the Role of Interfaces", *Journal of Vacuum Sci. & Technol. B* **21**, 1896 (2003).

39. **R. Magri** and A. Zunger, "Theory of Optical Properties of segregated InAs/GaSb Superlattices", *IEEE Optoelectronics* **150**, 409 (2003).

40. S. Ossicini, C. Arcangeli, O. Bisi, E. Degoli, M. Luppi, **R. Magri**, L. Dal Negro, and L. Pavesi, "Gain theory and models in silicon nanostructures" , "*NATO SCIENCE SERIES VOLUME: Towards the First Silicon Laser*" , ed. by L. Pavesi, S. Gaponenko, and L. Dal Negro, Kluwer Academic Publishers (Netherlands) s.l., (2003).

41. **R. Magri**, C. Ghidoni, and S. Ossicini, “Interface effects on the in-plane anisotropy of (InGaAs)/InP and (InAlAs)/InP superlattices” , *"Physics of Semiconductors 2002"* , ed. by A. R. Long and J. H. Davies, Institute of Physics Publishing, Bristol (UK) and Philadelphia (USA) , 103 , (2003)

42. L. Pavesi, L. Dal Negro, N. Dalbosso, Z. Gaburro, M. Cazzanelli, F. Iacona, G. Franzò, D. Pacifici, F. Priolo, S. Ossicini, M. Luppi, E. Degoli, and **R. Magri**, “Will silicon be the photonic material of the third millennium ?” , *"Physics of Semiconductors 2002"* , ed. by A. R. Long and J. H. Davies, Institute of Physics Publishing, Bristol (UK) and Philadelphia (USA) , 261 , (2003)

43. E. Degoli, S. Ossicini, M. Luppi, E. Luppi, **R. Magri**, G. Cantele, and D. Ninno, “Electronic and Optical Properties of Silicon Nanocrystals: Structural Effects” , *"Material Research Society Symposium Proceedings"* , 5932 , (2003).

44. N. Dalbosso, M. Luppi, G. Dalba, L. Pavesi, F. Rocca, F. Priolo, G. Franzò, F. Iacona, E. Degoli, **R. Magri**, and S. Ossicini, “Experimental and Theoretical Joint Study on the Electronic and Structural Properties of Silicon Nanocrystals Embedded in SiO₂: active Role of the Interface Region” , *"Material Research Society Symposium Proceedings"* , 5932 , (2003).

45. S. Ossicini, **R. Magri**, E. Degoli, M. Luppi, E. Luppi, “Surface and confinement effects on the optical and structural properties of silicon nanocrystals” , *"SPIE"* , 5222 , (2003)

2002

46. **R. Magri** and A. Zunger, “Effects of Interfacial Atomic Segregation and Intermixing on the Electronic Properties of InAs/GaSb Superlattices”, *Phys. Rev. B* **65**, 165302 (2002).

47. **R. Magri** and A. Zunger, “Segregation Effects on the Optical Properties of (InAs)/(GaSb) Superlattices”, *Physica E* **13**, 325 (2002).

48. S. Ossicini, E. Degoli, M. Luppi, and **R. Magri**, “Si Nanostructures Embedded in SiO₂: Electronic and Optical properties”, *Spie Proc. Series* **4808**, 83 (2002).

49. S. Ossicini, E. Degoli, M. Luppi, and **R. Magri**, “Si Nanostructures Embedded in SiO₂: Electronic and Optical properties” , *"SPIE 4808 Optical Properties of Nanocrystals"* , ed. by Gaburro, 73 , (2002)

50. S. Ossicini, E. Degoli, M. Luppi, and **R. Magri**, “Density functional calculations of the structural electronic and optical properties of semiconductor nanostructures” , *"Nanoscience and Nanoengineering"* , ed. by E. Andronescu, D. Dancalu, I. Kleps, L. Pavesi, Editura Academiei Romane Bucuresti (Romania), 52 , (2002)

2001

51. **R. Magri** and A. Zunger, “Effects of Interfacial Atomic Segregation on Optical Properties of InAs/GaSb Superlattices”, *Phys. Rev. B* **64**, 081305(R) (2001).

52. **R. Magri** and S. Ossicini, “In-Plane Anisotropy of the Optical Properties of In(0.5)Ga(0.5)As_n/InP_n Superlattices”, *Phys. Rev. B* **63**, 165303 (2001).

53. C. Ghidoni, **R. Magri**, and S. Ossicini, “The Electronic and Optical Properties of InGaAs/InP and InAlAs/InP Superlattices”, *Surface Science* **489**, 90-71 (2001).

2000

54. **R. Magri** and A. Zunger, “Anticrossing and Coupling of Light-Hole and Heavy-Hole States in (001) GaAs/Al_xGa_{1-x}As Heterostructures”, *Phys. Rev. B* **62**, 10364 (2000).

55. **R. Magri**, L.W. Wang, A. Zunger, I. Vurgaftman and J.R. Meyer, “Anticrossing semiconducting band gap in nominally semimetallic InAs/GaSb superlattices”, *Phys. Rev. B* **61**, 10235 (2000).

56. **R. Magri** and S. Ossicini, “Relation Between the In-Plane Polarization Anisotropy of the Optical Properties and the Microscopic Atomic Configuration of Ga_{0.5}In_{0.5}As/InP Superlattices” , *"Proceedings of the 25th International Conference on the Physics of Semiconductors, Osaka, Japan (September 2000)"* , (2000)

1998

57. **R. Magri** and S. Ossicini, “Ab-Initio Investigation of the Polarization Anisotropy of the Optical Absorption in (InGa)As-InP Superlattices”, *Physica Status Solidi A-Applied Res.* **170**, 331-336 (1998).

58. **R. Magri** and S. Ossicini, “Role of Symmetry Reduction in the Polarization Dependence of the Optical Absorption in Non-Common-Atom Superlattices”, *Phys. Rev. B* **58**, R1742 (1998).

59. **R. Magri** and S. Ossicini, "Crystal Field Symmetry Effects on the Polarization Anisotropy of Absorption in Non Common Atom Superlattices", *"The Physics of Semiconductors"*, World Scientific Singapore, 215-219, (1998)

1996

60. **R. Magri**, "Electronic Properties of Sb Deposited on GaAs(110) in the Submonolayer", *Phys. Rev. B* **54**, 2590-2599 (1996).

61. **R. Magri**, F. Manghi, and C. Calandra, "Electronic Properties of Sb on GaAs(110) in the Sub-Monolayer Coverage Regime", *Vuoto* **25 (3)**, 40-42 (1996).

62. **R. Magri**, F. Manghi, and C. Calandra, "Structural and Electronic Properties of Sb Islands on GaAs(110)", *Journal of Vacuum Sci. & Technol. B* **14**, 2901-2908 (1996).

1995

63. **R. Magri**, F. Manghi, and C. Calandra, "Electron-Electron Correlation for Sb on GaAs", *"Proc. of the 22nd Conf. on the Physics of Semiconductors, Vancouver 1994"*, ed. by D.J. Lockwood, World Scientific Singapore, 572-575, (1995)

1994

64. **R. Magri**, "Ordering in B_xC_{1-x} Compounds with the Graphite Structure", *Phys. Rev. B* **49**, 2805-2812 (1994).

1992

65. D. B. Laks, **R. Magri**, and A. Zunger, "Diamond-like order in zinc-blende compounds", *Sol. St. Comm.* **83**, No.1, 21 (1992).

1991

66. **R. Magri** and A. Zunger, "Thermodynamic instability of ordered (001) GaAlAs in bulk form", *Phys. Rev. B* **43**, 1584 (1991).

67. **R. Magri**, J. E. Bernard, and A. Zunger, "Predicting structural energies of atomic lattices", *Phys. Rev. B* **43**, 1593 (1991).

68. **R. Magri**, S. Froyen and A. Zunger, "Electronic structure and density of states of the random $Al_{0.5}Ga_{0.5}As$, $Ga_{0.5}As_{0.5}P$, and $Ga_{0.5}In_{0.5}As$ semiconductor alloys", *Phys. Rev. B* **44**, 7947 (1991).

69. **R. Magri** and A. Zunger, "Real-space description of semiconducting band gaps in substitutional systems", *Phys. Rev. B* **44**, 8672 (1991).

70. **R. Magri**, "Electronic properties of III-V pseudobinary compounds and alloys", Atti Accademia Peloritana dei Pericolanti, Vol. LXIX (1991).

1990

71. **R. Magri**, C. Mariani and G. Ottaviani, "Characterization of Bioacceptable Carbon Materials", Clinical Materials **5**,127 (1990).

72. **R. Magri**, "Electronic band structure of the $(GaAs)_1/(InAs)_1$ (111) superlattice", Phys. Rev. B **41**, 6020 (1990).

73. **R. Magri**, S.-H. Wei and A. Zunger, "Ground state structures and the random state energy of the Madelung lattice", Phys. Rev. B **Rapid Comm.** **42**,11388 (1990).

1989

74. **R. Magri** and C. Calandra, "Structural stability and valence charge density in $(GaAs)_1(InAs)_1$ (111) superlattice" Phys. Rev. B **40**,3896 (1989)

75. **R. Magri** and C. Calandra, "Search for stable configuration of $(GaAs)_1(InAs)_1$ (111) superlattice", Superl. and Microstr. **5**,1 (1989).

76. C. Calandra, G. Goldoni, F. Manghi and **R. Magri**, "Surface effects in the electronic properties of $YBa_2Cu_3O_7$ ", Surf. Sci., **211/212**,1127 (1989).

1986

77. **R. Magri** and C. Mariani, "Electron spectroscopy measurements of carbon deposited films", Vuoto XVI, **4**,217 (1986).

REVIEW ARTICLE

78. O. Pulci, M. Marsili, E. Luppi, C. Hogan, V. Garbuio, F. Sottile, **R. Magri**, and R. Del Sole, "Electronics excitations in solids: Density Functional and Green's function Theory", Physica Status Solidi (c) **242**, 2737-2750 (2005).

REPORTS

R. Magri, "Empirical Pseudopotential Modeling of Antimonide-Based III-V Structures", collected reports (2005), http://www.stormingmedia.us/authors/Magri_Rita.html

R. Magri, F. Manghi, and C. Calandra, "Structural and Electronic Properties of Sb Islands on $GaAs(110)$ ", on Science and Supercomputing at CINECA, 1995 Report.

R. Magri, "Proprietà elettroniche e strutturali di superreticoli di semiconduttori III-V", Tesi di dottorato, Consorzio Universitario Modena-Parma, Italia (1989).

VALUTAZIONE QUALITATIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Due articoli sono stati inclusi tra quelli valutati dal CIVR 2001-2003 tra i prodotti presentati dal Dipartimento di Fisica con il seguente risultato:

MAGRI R., ZUNGER A. (2002). *Effects of interfacial atomic segregation and intermixing on the electronic properties of InAs/GaSb superlattices.* PHYSICAL REVIEW. B, CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS. vol. 65 pp. 165302-1-165302-18 ISSN: 1098-0121 **IF (2006) = 3.107**
QUESTO LAVORO È STATO VALUTATO DAL CIVR (PERIODO 2001-2003) CON VALUTAZIONE: ECCELLENTE

Di questo lavoro sono primo autore (di solo due autori)

N. DALDOSSO, M. LUPPI, STEFANO OSSICINI, E. DEGOLI, MAGRI R., G. DALBA, P. FORNASINI, R. GRISENTI, F. ROCCA, L. PAVESI, F. PRIOLO, F. IACONA (2003). *Role of the interface region on the optoelectronic properties of silicon nanocrystals embedded in SiO₂.* PHYSICAL REVIEW. B, CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS. vol. 68 pp. 085327-1-085327-8 ISSN: 1098-0121 **IF (2006) = 3.107**
QUESTO LAVORO È STATO VALUTATO DAL CIVR (PERIODO 2001-2003) CON VALUTAZIONE: ECCELLENTE

Il maggior numero dei lavori è stato pubblicato sul Phys. Rev. B (regular articles or Rapid Communications) con un numero di citazioni molto maggiore di quelle che definiscono l'Impact Factor della Rivista.

In particolare:

GROUND-STATE STRUCTURES AND THE RANDOM-STATE ENERGY OF THE MADELUNG LATTICE

MAGRI R, WEI SH, ZUNGER A

Source: PHYSICAL REVIEW B Volume: 42 Issue: 17 Pages: 11388-11391

Di cui sono primo autore ha 93 citazioni (senza autocitazioni da parte mia)

e altri 15 hanno un numero di citazioni superiori a 10 con un numero medio di citazioni per articolo superiore a 12.

Ho tre lavori pubblicati sempre sul Phys. Rev. B come unico autore e in una decina di Phys. Rev. B con più di 10 citazioni sono primo autore.

CITAZIONI – h index

Results found: 49

Sum of the Times Cited : 602 (Without self-citations: 420)

Average Citations per Item: 12.29

h-index : 13

CONFERENZE

I risultati della mia ricerca sono stati presentati a numerosissimi convegni e conferenze.

CONFERENZA DOVE HO FATTO UNA COMUNICAZIONE ORALE O POSTER

2008

1. **R. Magri**, Stefan Heun, Giorgio Biasiol, Andrea Locatelli, Tevfik Mentis, Lucia Sorba, "Surface compositional profiles of self-assembled InAs/GaAs quantum rings", ICPS-29, Rio de Janeiro, Jul. 27- Aug. 1, 2008, ORAL

2. M. Rosini, M. C. Righi, P. Kratzer, and **Rita Magri**, "In adsorption and diffusion on In-rich (2x4) reconstructed InGaAs surfaces on GaAs(001)", ICPS-29, Rio de Janeiro, Jul. 27- Aug. 1, 2008, POSTER

2007

3. **R. Magri**, "Multiscale approaches to nanomechanics", Cecam Workshop, Lyon (Francia), February 5-7, 2007, POSTER

4. R. Magri, APS Meeting, 1-8/03/07, Denver, USA (Oral)

5. M. Rosini and **Rita Magri**, "Towards reality in nanoscale materials", Levi (Finland), December 10-13, 2007, ORAL

6. **R. Magri**, dal 25.09.2007 al 29.09.2007, ICCMSE, Corfù, Grecia (Oral)

2005

7. **R. Magri**, M. C. Righi, and C. M. Bertoni, ICTF13/ACSIN8 13th International Conference on Thin Films and 8th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces, and Nanostructures., 19-23 June 2005, Stockholm, Sweden (Oral).

8. **R. Magri**, A. Zunger, and H. Kroemer, 12th International Conference on Narrow Gap Semiconductors, NGS12, 3-7 July 2005, Toulouse, France (Oral).

9. **R. Magri**, F. Iori, E. Degoli, E. Luppi, S. Ossicini, G. Cantele, F. Trani and D. Ninno, Pik-2005 Conference, 17-21 September 2005, Schwabisch Gmund, Germany (Poster).

10. **R. Magri**, M. C. Righi, and C. M. Bertoni, Convegno Nanocose, 3-5 October 2005, Villa Mondragone, Università di Roma Tor Vergata, Rome (Poster).

2004

11. **R. Magri**, A. Zunger, and H. Kroemer, "Evolution of the band gaps and band edges of ternary $GaAs_xSb_{1-x}$, $InAs_xSb_{1-x}$, and quaternary $Ga_{1-y}In_yAs_xSb_{1-x}/GaSb$ and $Ga_{1-y}In_yAs_xSb_{1-x}/InAs$ alloys as a function of composition", 6th International Conference Mid-Infrared Optoelectronics Materials and Devices (MIOMD-6), June 28-July 02, 2004, St. Petersburg, Russia (oral).

12. **R. Magri**, “*Band Gaps and Band Edges of InGaAsSb Superlattice and Alloy Systems for Infrared Device Applications*”, IVC-16 (16th International vacuum Congress)-ICSS-12 (12th International Conference on Solid Surfaces) –NANO-8 (8-th International Conference on Nanometer-Scale Science and Technology), June 28-July 02, 2004, Venice, Italy (Oral).

13. **R. Magri**, A. Zunger, and H. Kroemer, ICPS-27, 27th International Conference on the Physics of Semiconductors, July 26-30, 2004, Flagstaff, Arisona, USA (Poster)

14. M. C. Righi, **R. Magri**, and C. M. Bertoni, ICPS-27, 27th International Conference on the Physics of Semiconductors, July 26-30, 2004, Flagstaff, Arisona, USA (Poster).

15. E. Degoli, G. Cantele, E. Luppi, **Rita Magri**, Stefano Ossicini, D. Ninno, O. Bisi, G. Onida. M. Gatti, A. Incze, O. Pulci, R. Del Sole, ICPS-27, 27th International Conference on the Physics of Semiconductors, July 26-30, 2004, Flagstaff, Arisona, USA (Poster).

2003

16. **R. Magri**, C. Ghidoni, and S. Ossicini, 26th International Conference on the Physics of Semiconductor, ICPS-22, Edimburgh, 29 july- 2 August 2002.

17. E. Degoli, **R. Magri**, M. Luppi, E. Luppi, and S. Ossicini, “*Optical and Structural Properties of Silicon Nanocrystals : Interface versus Confinement Effects*”. WORKSHOP EXCITING 2003, Louvain-la-Neuve, Belgium (April 14, 2003).

2002

18. **R. Magri** and A. Zunger," *Segregation effects on the optical properties of (InAs)/(GaSb) superlattices* "MSS10, Linz, Austria, Luglio 2001.

19. **Rita Magri**, Silicon Workshop, Genova, 2002.

20. **Rita Magri**,“Optical Properties of segregated InAs/GaSb Superlattices”, MIOMD-V Annapolis, Maryland, USA (September 9, 2002).

21. Marcello Luppi, Elena Degoli, **Rita Magri**, and Stefano Ossicini, "*First-Principles Calculations of the Optoelectronic Properties of Silicon Nanodots*" ,“CECAM-ESF/Psik Workshop “*Ab-initio Theoretical Approaches to the Electronic Structure and Optical Spectra of Materials*”, Lyon 23-25 September 2002.

2001

22. **Rita Magri**, Roma, congresso INFMeeting, giugno 2001.

23. **R. Magri** and A. Zunger," *Segregation effects on the optical properties of (InAs)/(GaSb) superlattices* ", MSS10, Linz, Austria, Luglio 2001.

2000

24. **R. Magri** and S. Ossicini, "Relation between the in-plane polarization anisotropy of the optical properties and the microscopic atomic configuration of $Ga_{0.5}In_{0.5}As/InP$ superlattices " 25th International Conference on the Physics of Semiconductors, Osaka, Settembre 2000.

1998

25. **R. Magri** and S. Ossicini, "Role of symmetry reduction in the polarization anisotropy of the optical absorption in no-common atom superlattices", Epioptics 5, Erice, Italy, giugno 1998 (Oral).

26. **R. Magri**, Rimini, congresso INFMeeting, giugno 1998.

27. **R. Magri** and S. Ossicini, "CRYSTAL FIELD SYMMETRY EFFECTS ON THE POLARIZATION ANISOTROPY OF ABSORPTION IN NON COMMON ATOM SUPERLATTICES" 24th International Conference on the Physics of Semiconductors, Gerusalemme, Agosto 1998.

1996

28. **R. Magri**, F. Manghi, and C. Calandra, "Structural and electronic properties of Sb islands on $GaAs(110)$ ", PCSI-23, La Jolla, California, January 21-25, 1996 (Oral-Poster).

1995

29. **R. Magri**, F. Manghi, and C. Calandra, "Electronic properties for Sb on $GaAs(110)$ in the submonolayer coverage regime", XVIII Encontro Nacional de Fisica da Matéria Condensada, Caxambu, Minas Gerais, Brazil, June 6-10, 1995 (Oral).

1994

30. **R. Magri**, F. Manghi, and C. Calandra, "Electron-electron correlation for Sb on $GaAs(110)$ ", 22nd International Conference on the Physics of Semiconductors, Vancouver, Canada, August 15-19, 1994 (Poster).

31. **R. Magri**, "Electronic properties of Sb overlayers on $GaAs(110)$ in the submonolayer regime", Research Conference on Dynamical properties of solids: phonons in solids and at surfaces, "Il Ciocco", near Lucca, Italy, September 17-21, 1994 (Poster).

32. **R. Magri**, F. Manghi, and C. Calandra, "Electron-electron correlation for Sb overlayers on $GaAs(110)$ in the submonolayer regime", 19th Annual Meeting Advances in surface and interface Physics}, Modena, Italy, December, 19-21, 1994 (Oral).

1993

33. **Rita Magri**, "Structural stability of B_xC_{1-x} ordered configurations", European Research Conference on Electronic Structure of Solids, Porto Carras, Greece, September 18-23, 1993 (Poster).

1992

34. **R. Magri**, NSERC-CAP Summer Institute in Theoretical Physics, Workshop on Density Functional Theory: Methods and Applications, Kingston, Canada, July 5-11, 1992 (**Poster**).

1991

35. **R. Magri**, and A. Zunger, "*Predicting structural energies of ternary AlGaAs Alloys, Superlattices and Compounds*", APS March Meeting, Cincinnati, Ohio, USA, March 1991 (**Oral**).

36. **R. Magri** and A. Zunger, "*Density of states of pseudobinary III-V semiconducting alloys*", APS March Meeting, Cincinnati,

1990

37. **R. Magri**, APS March Meeting, Anaheim, California, USA, March 1990 (**Oral**).

1989

38. **R. Magri**, 4th International Workshop on Computational Condensed Matter Physics Total Energy and Force Methods, Trieste, Italy, January 4-6, 1989 (**Poster**).

39. **R. Magri**, C. Mariani, and G. Ottaviani, "Characterization of bioacceptable carbon materials", E-MRS Conference, Strasbourg, France, May 30 - June 2, 1989 (**Oral**).

1988

40. **R. Magri**, C. Calandra, "*Search for stable configuration of $(GaAs)_1(InAs)_1(111)$ superlattice*", 4th International Conference on Superlattices, Microstructures and Microdevices, Trieste, Italy, August 8-12, 1988 (**Oral**).

41. **R. Magri**, C. Calandra, "*Total energy calculation for $(GaAs)_1(InAs)_1$ superlattice*", 13th Annual Meeting { Advances in surface and interface physics }, Modena, Italy, December 20-22, 1988 (**Oral**).

42. C. Calandra, G. Goldoni, F. Manghi and **R. Magri**, "Surface effects in the electronic properties of $YBa_2Cu_3O_7$ " ECOS-10, Bologna, Italy, 5-8 September 1988 (Poster).

CONTRIBUTI SCIENTIFICI

SOMMARIO

Nella sua globalità, il mio lavoro di ricerca è stato ispirato dal seguente motto: “ Descrivere la complessità partendo da una descrizione microscopica delle interazioni tra le particelle costituenti la materia, elettroni e ioni”. La descrizione microscopica è ottenuta tramite l'utilizzo (e lo sviluppo) di tecniche di calcolo della struttura a bande elettronica basate sia su un approccio ab-initio tramite l'applicazione della teoria del funzionale densità (DFT) sia su approcci semi-empirici, quali lo pseudopotenziale semiempirico o il metodo tight-binding, o, nel caso delle sole energie di deformazione elastica, il metodo del Valence Force Field. L'utilizzo dell'uno o dell'altro metodo dipende dal tipo di sistema, dalle sue dimensioni e dalla accuratezza richiesta nella descrizione fisica.

L'idea fondamentale è quindi quella di utilizzare i risultati dei calcoli su sistemi di piccole dimensioni, o su sistemi modello, opportunamente scelti, per parametrizzare altri modelli più semplici da studiare con cui poi affrontare l'analisi di situazioni complesse: questi ultimi modelli sono basati essenzialmente su Hamiltoniane modello (Hubbard, Ising) oppure su metodologie di simulazione dei processi stocastici quali il Monte Carlo (Kinetic Monte Carlo o Finite temperature Monte Carlo, basato sull'algoritmo di Metropolis).

I punti essenziali dell'attività di ricerca da me svolta finora ha riguardato:

- 1) **Lo studio delle leghe ternarie e/o pseudobinarie.** Questo ha riguardato: (1) l'analisi delle proprietà elettroniche di superreticoli a corto periodo orientati in diverse direzioni, tramite calcoli ab-initio. (2) L'estrazione da questi calcoli dei parametri di energia (energia totale, di Madelung, energia del gap fondamentale) per la costruzione di una Hamiltoniana tipo Ising. Questo è stato ottenuto applicando il metodo dello sviluppo in cluster. (3) La soluzione di quest'ultima hamiltoniana per determinare le strutture di stato fondamentale e il diagramma di fase termodinamico (ordine-disordine-separazione di fase). (4) Lo studio, tramite una combinazione dello sviluppo in cluster e delle strutture speciali quasirandom, degli effetti di coordinazione locale sugli atomi di una lega, al fine di riconoscere come l'environment di ogni atomo contribuisce sul contributo locale di quell'atomo nella DOS totale. Infatti atomi dello stesso tipo hanno DOS locali diverse a seconda della particolare configurazione dei loro primi, secondi e terzi vicini. Due sono i sistemi studiati con queste tecniche: le leghe pseudobinarie III-V sul reticolo della zinc-blenda e la lega semi-metallica Carbonio-Boro sul reticolo esagonale grafitico. Nell'ambito di questo lavoro molteplici sono stati i miei contributi originali. **Sviluppo attuale di questo lavoro:** sto studiando come applicare queste tecniche nel caso delle ricostruzioni superficiali di leghe.
- 2) **Lo studio della correlazione elettronica nel regime $U > W$ (forte correlazione).** In questo ambito ho studiato gli effetti della correlazione elettronica negli stati elettronici semi-occupati al bordo terrazza nel caso di isole di Sb sulla superficie GaAs(001). In mancanza di ricostruzioni particolari, ai bordi di terrazza sono associati legami pendenti dovuti agli atomi Sb non completamente coordinati. Di conseguenza il calcolo DFT della struttura elettronica predice sistemi metallici. Questo in contrasto con risultati sperimentali STM che mostrano l'esistenza di un chiaro gap ottico proprio al bordo di terrazza dovuto agli stati elettronici localizzati sugli steps. L'inclusione della correlazione forte tra gli elettroni localizzati nei legami pendenti, trattata tramite un hamiltoniana di Hubbard nello schema 3BS sviluppato al Dipartimento di Fisica da Carlo Calandra e Franca Manghi, ha permesso di aprire un gap

all'Energia di Fermi e di ottenere una struttura a bande abbastanza simile al risultato sperimentale con un parametro di Hubbard di alcuni eV. Anche in questo caso le funzioni d'onda relative agli stati elettronici entranti nel formalismo 3BS sono stati ricavati dai calcoli ab-initio. **Sviluppi:** questo lavoro può essere ripreso attraverso uno studio più completo della struttura atomica dei bordi delle terrazze, per capire se il gap osservato non possa essere dovuto a particolari ricostruzioni atomiche in prossimità degli steps. All'epoca di questo lavoro (1996) i metodi di calcolo ab-initio non erano ancora capaci di trattare sistemi e problemi di questa complessità, cosa che invece oggi sarebbe tecnicamente possibile.

- 3) **Studio dell'anisotropia ottica in piano di eterostrutture di semiconduttori III-V senza atomo comune e studio della birifrangenza in super-reticoli di corto periodo.** In questo caso è stata osservata una ulteriore anisotropia in piano in super-reticoli III-V i cui componenti hanno atomi del gruppo III e del gruppo V diversi: ad esempio: InAs/GaSb e InGaAs/InP. Lo scopo di questo studio è stato determinare l'entità di questo effetto e come dipendeva dalle caratteristiche dell'interfaccia. In particolare si è cercato di capire se poteva essere utilizzato nella generazione di effetti ottici non lineari importanti in questi sistemi, un obiettivo di rilevante interesse tecnologico. Nell'ambito di questo lavoro ho messo a punto un codice per il calcolo del tensore dielettrico che è poi diventato la base per studi di guadagno ottico (vedi successivo punto 5). In particolare il lavoro fatto può essere suddiviso in varie tappe: (i) Studio ab-initio del sistema $(\text{InGaAs})_n/(\text{InP})_n$ – (ii) Studio dell'accoppiamento lh1-hh2 nei superreticoli $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ – (iii) Calcolo della birifrangenza in super-reticoli di periodo molto corto e senza atomo comune -- **Sviluppo possibile di questo lavoro:** la determinazione dei potenziali d'interfaccia dai metodi atomistici può essere mappata entro il metodo k.p che usa un approccio del continuo. Questo permetterebbe di creare un "ibrido" che aiuterebbe entrambi i metodi a superare i rispettivi limiti. Una tesi di laurea (alcuni anni fa) e poi una di dottorato (l'anno scorso) sono state proposte in co-tutoraggio con Guido Goldoni per compiere questo lavoro. Nessuno si è fatto vivo.
- 4) **Studio del sistema InAs/GaSb : superreticoli e leghe quaternarie.** Questo sistema è molto interessante per dispositivi all'infrarosso e presenta varie caratteristiche sue proprie: è un superreticolo senza atomo comune e quindi rientra nel caso studiato al punto (3) sopra. Per di più ha un allineamento di banda di tipo "broken gap". Buona parte di questo lavoro ha riguardato la messa a punto di potenziali semiempirici per gli atomi Ga, In, Sb e As ottenuti attraverso la parametrizzazione di un numero molto grande di dati sperimentali e/o calcolati ab-initio riguardanti le proprietà fondamentali della struttura a bande dei quattro composti InAs, GaSb, GaAs, e InSb. Grande attenzione va poi posta nell'ottimizzazione dei potenziali per la descrizione delle proprietà elettroniche delle interfacce tra i diversi composti. I risultati ottenuti hanno riguardato: (i) lo studio dei minigaps nella fase semimetallica, (ii) lo studio dei potenziali d'interfaccia nella fase semiconduttrice, (iii) lo studio degli effetti della segregazione sulle funzioni d'onda e le energie degli stati elettronici. Quest'ultimo punto ha comportato l'implementazione di un modello cinetico della segregazione di cui ho scritto il codice. (iv) lo studio degli allineamenti di banda tra leghe ternarie formate dai quattro tipi di atomi. (v) lo studio delle leghe quaternarie in accordo reticolare col InAs e GaSb cresciute lungo diverse direzioni reticolari, e infine, (vi) l'effetto dell'ordine a corto raggio sul gap delle leghe quaternarie. **Lo sviluppo possibile di questo lavoro** è lo studio della dipendenza dello spin-splitting in questi sistemi in funzione del disordine all'interfaccia, la composizione, e tutti i parametri strutturali in gioco. Infatti lo scopo è trovare il modo di tunare lo spin-splitting in modo da adattarlo a quello di un possibile sistema iniettore di spin. Conseguenza di questo studio è anche la determinazione dei tempi di rilassamento dello

spin. Questo studio è reso interessante dal fatto che i modelli tuttora esistenti non riescono a dar conto dei dati sperimentali del rilassamento di spin con la temperatura o altri parametri.

- 5) **Le nanostrutture basate sul silicio.** L'attività di ricerca svolta usa metodi e codici a primi principi basati su DFT in approccio a pseudopotenziali, per lo studio delle proprietà elettroniche, ottiche e strutturali di sistemi a bassa dimensionalità. L'attenzione è stata focalizzata in particolare sulle nanostrutture di silicio (2-, 1-, 0- dimensionali) e sugli effetti indotti dalla dimensionalità, dagli agenti passivanti la superficie, dalle impurezze e dalla simmetria sulle proprietà del materiale. La maggior parte dei componenti elettronici sono basati sul silicio. Tuttavia i componenti optoelettronici "attivi" sono in generale sintetizzati mediante semiconduttori III-V o II-VI. Negli ultimi anni sono stati fabbricati componenti optoelettronici "passivi" basati sul silicio (rivelatori, guide d'onda, modulatori, ecc.), pertanto se fosse possibile costruire anche componenti "attivi" basati sul silicio si potrebbe dal punto di vista tecnologico fabbricare tutti i componenti di un circuito denso (VLSI, Very Large Scale Integration) a partire da un unico materiale. Questo spiega gli sforzi per cercare materiali basati sul silicio modificati in modo tale da emettere luce con efficienza nel visibile. Il silicio è un semiconduttore a gap indiretta che emette nell'infrarosso con efficienza molto bassa (un fotone ogni milione di elettroni iniettati). Nel 2000 l'osservazione di guadagno ottico da nanocristalli di silicio in matrice di ossido di silicio da parte di L. Pavesi e collaboratori (Nature **408**, 440 (2000)) ha dato nuovo impulso alle ricerche su silicio emettitore di luce aprendo la strada alla potenziale realizzazione del primo laser al silicio. La comprensione e il controllo di questi materiali innovativi richiede la comprensione dei numerosi e concomitanti meccanismi fisici alla base delle particolari proprietà osservate. Sono state studiate le proprietà strutturali, elettroniche e ottiche di nanostrutture di silicio, tra cui piccoli clusters, drogati e non, passivati in vario modo in superficie o immersi in una matrice di SiO₂, in funzione della loro dimensione e della forma. Gli studi sono stati effettuati tramite calcoli ab-initio nel formalismo DFT-LDA o GGA. E' stata applicata la teoria del constraint density functional per studiare le proprietà strutturali dello stato eccitato, trovando che le geometrie dei piccoli clusters eccitati differiscono notevolmente da quelle dello stato fondamentale. Molto lavoro è tuttora in corso per ricavare una descrizione più esauriente dello stato eccitato combinando queste teorie con le teorie many body sviluppate a Roma Tor Vergata o alla Ecole Polytechnique a Paliseau. Questo sarà la base per l'ulteriore sviluppo di una teoria capace di descrivere il guadagno ottico osservato in questi sistemi.
- 6) **La simulazione della crescita di nanostrutture su superfici III-V.** Questo è l'ultimo topic in ordine temporale. La crescita di una hetero-interfaccia è un problema molto complicato in cui molti processi hanno luogo, simultaneamente su scale temporali e spaziali molto diverse. Questo studio richiede lo sviluppo di tecniche multiscala. Questo è in un certo senso l'approdo attuale (insieme allo studio del guadagno ottico) della mia ricerca che, come si è detto sopra, si propone di: "Descrivere la complessità partendo da una descrizione microscopica delle interazioni tra le particelle costituenti la materia, elettroni e ioni". Le tecniche multiscala di propongono, infatti, di collegare i fenomeni che avvengono sulle diverse scale temporali e spaziali. Si parte dalla descrizione microscopica offerta dalle teorie ab-initio (almeno per le regioni "importanti") per estrarre da esse i parametri che entrano in descrizioni più coarse-grained, dove solo certi comportamenti "medi" sono influenti e i cosiddetti eventi rari giocano un ruolo. Questo è il punto di partenza per quella che sarà la mia attività futura. In questo contesto sono state studiate le proprietà di alcune ricostruzioni delle superfici dei III-V tecnologicamente importanti ed è stato studiato il processo di adsorbimento e diffusione di atomi del gruppo III e di molecole biatomiche del gruppo V.

Nota: sulle linee indicate sopra, tranne la linea 5, non ho potuto contare sul supporto di nessun laureando o dottorando.