

ATTIVITÀ SCIENTIFICA

Gli argomenti principali dell'attività scientifica della Dott.ssa Maria Noelia Faginas Lago hanno riguardato lo studio teorico-computazionale della dinamica dei processi chimici elementari di interesse in vari campi applicativi con particolare interesse:

1. Allo sviluppo di metodologie teorico-computazionali

- per lo sviluppo di approcci basati sul calcolo intensivo per lo studio della dinamica dei processi elementari di interesse per l'astrochimica e la chimica delle atmosfere planetarie e le relative simulazioni dei processi di produzione/trasferimento di energia. A tale scopo sono state prodotte ed applicate metodologie innovative di calcolo quantistico, e classico delle proprietà dei sistemi atomo-diatomo, delle probabilità di reazione e della stima degli osservabili sperimentali (sezioni d'urto e coefficienti di velocità di reazione) con particolari riferimento alle reazioni $H+D_2$, $He+H_2$, $H+Cl_2$.
- per l'implementazione del formalismo delle coordinate Bond-order per il fitting delle superficie di energia potenziale e il calcolo delle probabilità stato-stato dei sistemi atomo-diatomo nei processi elementari.
- per il disegno di programmi basati sulla tecnica Semiclassica (SC) Initial Value Representation (IVR) che evitando la ricerca delle traiettorie *radice*, utilizza a pieno le caratteristiche parallele e distribuite delle moderne piattaforme di calcolo. Specifiche applicazioni sono state sviluppate per le reazioni elementari tipo: $H+H_2$, $N+N_2$, $He+H_2$.

Collaborazioni con il Prof. G. Ferraro (Università di Bari, Italia), Prof. A. Laganà (Università degli Studi di Perugia), Prof. Ernesto García Para (Universidad Pais Vasco, Vitoria, Spagna), Prof. Fermin Huarte (UB, Barcelona, Spagna). I risultati prodotto da questa linea di ricerca sono illustrati nella pubblicazione n. 2, 3, 4, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 22, 37 (dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche).

2. Alla implementazione di tecnologie computazionali innovative

- per il calcolo di coefficienti di velocità con proiezione della popolazione sugli stati finali dei prodotti usando l'approccio Multi Configuration Time Dependent Hartree (MCTDH) per le reazioni di idrogeno e azoto.
- per l'assemblaggio di un simulatore distribuito su "GRID" (GEMS) per il calcolo di proprietà di sistemi molecolari.

Collaborazioni con il Prof. A. Laganà (Università degli Studi di Perugia), Prof. Fermin Huarte (UB, Barcelona, Spagna). I risultati prodotto da questa linea di ricerca sono illustrati nella

pubblicazione n. 12, 16, 17, 18, 24, 26, 29, 36 (dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche).

3. Alla realizzazione di nuove applicazioni molecolari

- mediante il raffinamento del modello di potenziale Adapted Molecular Polarizability centres for Force fields (AMPF) applicato a sistemi contenenti legami peptidici come la N-methylacetamide (NMA).
- tramite campagne di calcoli di dinamica molecolare classica usando il codice DL_POLY per sistemi NMA-NMA, NMA-H₂O con applicazioni ai calcoli per i sistemi K⁺-H₂O, Na⁺-H₂O, K⁺-C₆H₆, C₆F₆ e NMA in soluzioni acquose a diverse concentrazioni.

Collaborazioni con il Prof. A. Laganà e il Prof. F. Pirani (Università degli Studi di Perugia), Prof. M. Albertí e il Prof. Fermin Huarte (UB, Barcelona, Spagna), Prof. Sergio Vela (Universidad Autonoma de Madrid, Spagna). I risultati prodotto da questa linea di ricerca sono illustrati nella pubblicazione n. 13, 19, 21, 25, 27, 28, 30, 31, 32, 33, 39, 43, 44, 50 (dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche). La pubblicazione. n. 50 è in ultima fase di preparazione.

4. Alla progettazione di tecnologie chimiche

- per lo sviluppo di metodi di stoccaggio di H₂ mediante adsorbimento di H₂ sui varie tipi di SWNT layer di grafene con orientazioni diverse della molecola di idrogeno.
- per la determinazione dei meccanismi di formazione dei clatrati idratati di metano catalizzati da tensioattivi (quali ad esempio l'SDS) per lo storage chimico dell'energia.
- per il calcolo accurato e sistematico di coefficienti di velocità per lo studio delle atmosfere e degli effetti della presenza di CO₂
- per la stima delle costanti di velocità microcanoniche in reazioni complesse multicanale da calcoli effettuazioni di calcoli statistici RRKM

Collaborazioni con il Prof. A. Laganà, Prof. M. Rosi e il Dr. A. Lombardi (Università degli Studi di Perugia), Dr. D. Skouteris (Scuola Normale Superiore, Pisa, Italia) Prof. Fermin Huarte (UB, Barcelona, Spagna), Prof. Alfredo Sánchez de Merás e Prof. Jose Sánchez (Universitat Valencia, Valencia, Spagna), Dr. Y. Wang (Universidad Autonoma de Madrid e Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA-Nanociencia), Madrid, (Spagna). I risultati prodotto da questa linea di ricerca sono illustrati nella pubblicazione n. 34, 35, 38, 40, 41, 42, 45, 46, 47, 48, 49, 51 dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche (le pubblicazioni n. 45, 46 sono state sottomesse, le pubblicazioni n. 47, 48, 49 e 51 sono in fase finale di preparazione).

Membro commissioni di Dottorato

- Membro della commissione dell'esame finale per il conseguimento del titolo di Dottore di Ricerca dello studente Marc Moix Teixidor presso l'Univesitat di Barcelona, Barcelona (Spagna) 31 Ottobre 2012
- La Dott.ssa Faginas Lago è stata **supervisore delle Tesi Magistrale di Laurea ed dell'EuroMaster** (Laurea Magistrale in Scienze Chimiche a Perugia che conferisce anche il titolo europeo (ECTN) **Chemistry Euromaster**)

(co-relatore) Dilara Oksuk (Università di Perugia in collaborazione con l' Universidad Autonoma de Madrid, Spagna) per la tesi finale dell'EuroMaster in Scienze Chimiche del titolo "**Adsorption of hydrogen molecules on carbon nanotubes using quantum chemistry and molecular dynamics**". Anno Accademico 2011/2012

(relatore) Md Bin Yeamin (Università di Perugia in collaborazione con La Universidad de Valencia, Spagna) per la tesi finale della Laurea Magistrale in Scienze Chimiche del titolo "**Molecular Modelling and Simulation of Hydrogen Adsorption over Graphene**". Anno Accademico 2013/2014

(co-relatore) Rami Ali Mohamed Shafei (Università di Perugia in collaborazione con La Universidad Autonoma de Madrid, Spagna) per la tesi finale del dell'EuroMaster in Scienze Chimiche del titolo "**Solvation structure of Na⁺**". Anno Accademico 2013/2014

(co-relatore) Laura Caponi (Università di Perugia) per la tesi finale della Laurea Magistrale in Informatica del titolo "**Implementation of the Semiclassical parallel algorithms for the molecular dynamics**". Anno Accademico 2005-2006

Segue un resoconto dettagliato dei principali risultati ottenuti per i vari sistemi.

INDICE

A. Allo sviluppo di metodologie teorico-computazionali p. 25-26

1. Calcolo quantistico, semiclassico e quasi-classico usando coordinate non ortogonali
 - 1.2 Parallelizzazione del codice
2. Sviluppo del codice Semiclassical- Initial Value Representation (SC-IVR)
3. Implementazione del metodo SC-IVR ai fine di includere gli effetti quantistici nelle simulazione classiche di dinamica molecolare.
 - 3.1 Calcoli di costante di velocità e confronto con altri metodi teorici

B. Alla implementazione di tecnologie computazionali innovative p. 27

4. Implementazione delle proiezioni degli stati finali nel calcolo delle sezioni di urto reattive.

C. Alla realizzazione di nuove applicazioni molecolari p. 27-30

5. Dinamica Molecolare Classica usando DL_POLY.
 - 5.1 Implementazione del potenziale Adapted Molecular Polarizability centres for Force fields (AMPF).
 - 5.2 Sistema H₂O liquida.
 - 5.3 Sistemi NMA-NMA, NMA-H₂O.
6. Applicazioni a sistemi: K⁺-H₂O, Na⁺-H₂O, K⁺-C₆H₆, C₆F₆.

D. Alla progettazione di tecnologie chimiche p. 30-32

7. Calcoli di dinamica molecolare DL_POLY, per lo studio della formazione di clatrati idratati catalizzata con dei tensioattivi (SDS).
8. Calcolo accurato e sistematico di coefficienti di velocità per lo studio delle atmosfere e degli effetti della presenza di CO₂
9. Attività di ricerca attuale : adsorbimento di H₂ sulle varie tipologie .
 - 9.1 Nanotubi (CNT).
 - 9.2 Fogli di grafene.
10. Calcoli statistici Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus di costanti di velocità microcanoniche per reazioni complesse multicanale

A. Allo sviluppo di metodologie teorico-computazionali

1. Calcolo quantistico, semiclassico e quasi-classico usando coordinate non ortogonali

Durante il periodo della Tesi di Dottorato e i primi anni a seguire la candidata ha implementato un codice per testare l'uso di coordinate non ortogonali e il suo impatto/bontà per il calcolo quantistico, quasiclassico e semiclassico delle proprietà dei sistemi atomo diatomo. Le coordinate non ortogonali sono le uniche che consentono di passare direttamente dai reagenti ai prodotti senza dovere effettuare un cambio di coordinate; questo implica anche una diminuzione nel costo computazionale del calcolo. Va ricordato che la formulazione dell'Hamiltoniano in coordinate non

ortogonali ha una maggiore complessità.

La candidata ha sviluppato l'intero formalismo matematico associato al problema. Allo scopo di testare questo codice, nei primi lavori è stato inizialmente applicato ai sistemi collineari atomodiatomo. Ciò ha portato ad un più gestibile set di equazioni, che hanno permesso di diminuire il tempo di calcolo impiegato dal codice. La bontà del codice che impiega le coordinate non ortogonali è stata testata con i sistemi collineari $H+H_2$ e $H+Cl_2$. Per questi sistemi, i vantaggi delle coordinate non ortogonali compensano ampiamente l'aumentata difficoltà nella formulazione dell'Hamiltoniano.

1.2 Parallelizzazione del codice

Dopo avere sviluppato il codice in coordinate non ortogonali, la candidata ha anche implementato le routine contenenti gli algoritmi per una piattaforma di calcolo parallelo. Il codice parallelo è stato utilizzato per il calcolo delle probabilità quantistiche reattive per il sistema collineare $H+H_2$.

I risultati sono illustrati nella *pubblicazione N. 3* dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche.

2. Sviluppo del codice Semiclassical- Initial Value Representation (SC-IVR).

Il metodo SC-IVR è un metodo approssimato che include gli effetti quantistici nelle simulazioni di dinamica molecolare classica (DMC). La DMC può essere applicata oggi a una vasta gamma di fenomeni complessi molecolari come le reazioni chimiche in fase liquida, i processi biomolecolari e i processi eterogenei ed è formalmente in grado di descrivere diversi effetti quantistici come l'interferenza / coerenza, l'effetto tunnel, l'energia vibrazionale di punto zero, e la simmetria delle particelle identiche. In particolare per la sua natura, il metodo IVR consente un'implementazione pratica della teoria Semiclassica (SC) per i sistemi molecolari altamente complessi, a condizione che il tempo di calcolo sia ragionevole. Nel metodo SC-IVR, il calcolo dell'integrale delle condizioni al contorno (che normalmente è la maggiore difficoltà nell'uso della teoria SC) è sostituito dall'approccio Monte Carlo mediato su coordinate e momenti iniziali delle traiettorie classiche. L'operatore di evoluzione temporale fornisce nel metodo SC-IVR l'intervallo dei valori nello spazio delle fasi sulle condizioni iniziali. L'approccio semiclassico risolve il "problema del segno" che nel metodo SC-IVR viene chiamato "fase stazionaria Monte Carlo" o "filtro di Filinov modificato". In altre parole, si utilizza uno schema di filtro Gaussiano per eliminare le oscillazioni ad alta frequenza nella formulazione matematica, portando ad una procedura Monte Carlo che favorisce le regioni della fase stazionaria. Di conseguenza, non richiede esplicitamente la ricerca dei punti di fase stazionaria, perché la procedura Monte Carlo lo fa implicitamente (il metodo Metropolis è stato implementato nella nostra versione del codice).

Per testare il codice sviluppato dalla candidata, è stato applicato al calcolo e confronto con metodi quantistici della probabilità per sistemi collineari reattivi e non reattivi come $H+H_2$, $H+Cl_2$, $He+H_2$

(articoli 2,4,7 della lista dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche).

3. Implementazione del metodo SC-IVR ai fine di includere gli effetti quantistici nelle simulazione classiche di dinamica molecolare

L'obiettivo di questo argomento di ricerca è stata la realizzazione di un programma che impiega le funzioni di correlazioni di flusso e il metodo SC-IVR per calcolare i coefficienti di velocità di reazioni atomo - diatomo utilizzando le infrastrutture di calcolo distribuito "GRID". Questo tema è nato durante la collaborazione intrapresa dalla candidata con il Prof. Fermin Huarte (UB, Barcelona, Spagna) allo scopo di confrontare sistematicamente i risultati del metodo SC_IVR con quelli ottenuti dal programma di meccanica quantistica MCTDH (multi-configurational time dependent Hartree), attualmente considerato uno degli strumenti più potenti nel campo della dinamica di reazione quantistica per il calcolo dei coefficienti di velocità.

3.1 Calcoli di costante di velocità e confronto con altri metodi teorici

Come già detto, la candidata ha configurato gli strumenti di calcolo necessari per eseguire studi di dinamica molecolare SC-IVR e fare il porting del codice su piattaforma GRID. Le prime simulazioni di prova su macchine seriali nella piattaforma GRID hanno prodotto alcuni risultati (coefficienti di velocità $k(T)$) per le seguenti reazioni: $H + H_2$, $D + H_2$, $N + N_2$.

Il risultati ottenuti sono stati confrontati con quelli ottenuti dal metodo quantistico MCTDH, e hanno dimostrato un accordo eccellente incoraggiando l'applicazione del metodo per sistemi più "pesanti" sia dal punto di vista atomico sia dal punto di vista computazionale, come $N + N_2$. Lo studio della reazione $N + N_2$ ha portato a importanti risultati relativi all'intensa attività molecolare che si produce nella fase di rientro dei veicoli spaziali nella atmosfera terrestre e nella atmosfera di altri pianeti del sistema solare, la cui atmosfera contiene una elevata quantità di azoto. I risultati prodotti da questa linea di ricerca sono ampiamente documentati nelle pubblicazioni n. 6, 7, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 22, 37 (dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche).

B. Alla implementazione di tecnologie computazionali innovative

4. Implementazione delle proiezioni degli stati finali nel calcolo delle sezione di urto reattive.

La candidata usando il codice sviluppato SC-IVR ha implementato una nuova superficie di energia potenziale (da qui in avanti indicata con l'acronimo PES dall'inglese Potential Energy Surface) per sistemi più pesanti ($N + N_2$). Questa PES presenta una buca di energia potenziale fra due barriere, che causa risonanze quantistiche nel calcolo della probabilità di reazione. La candidata ha effettuato dei calcoli usando il metodo MCTDH per lo sviluppo della propagazione del pacchetto d'onda e calcolo delle probabilità stato-a-stato usando le funzione di correlazione di flusso, mediato sugli

insiemi microcanonici. La candidata ha, peraltro, incluso la proiezione degli stati iniziali. Sono stati fatti calcoli estesi per la reazione $D + H_2$, con raggiungimento della convergenza dei risultati rispetto al set di base.

All'interno di questa attività di ricerca, la candidata ha fatto un'implementazione accurata dei metodi MCTDH e SC-IVR nella infrastruttura di computer distribuiti GRID. Questa implementazione ha reso possibile calcoli massivi per i sistemi leggeri (come $H + H_2$) e quelli più pesanti (come $N + N_2$) fornendo risultati dettagliati delle proprietà delle reazioni atomo-diatomo, tramite il calcolo delle probabilità di reazione cumulative e dei valori delle costanti di velocità termalizzate.

La candidata ha anche implementato altre PES per $N + N_2$ più accurate, in modo da evitare il calcolo degli elementi della matrice S (richiesta elevatissima di tempo computazionale) per ottenere i valori quantistici dei coefficienti di velocità e determinare il calcolo degli osservabili direttamente.

I risultati prodotti da questa linea di ricerca sono ampiamente documentati nelle pubblicazioni n. 12, 16, 17, 18, 24, 26, 29, 36 dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche.

C. Alla realizzazione di nuove applicazioni molecolari

5. Dinamica Molecolare Classica usando DL_POLY

La candidata ha fatto uso del codice commerciale Open Source DL_POLY per i calcoli di Dinamica Molecolare Classica per lo studio di sistemi più complessi che non possono essere analizzati con codici più accurati (come quelli descritti sopra) perché richiedono un tempo di calcolo troppo grande rispetto alle risorse di calcolo disponibili (considerato anche il calcolo distribuito). Il primo calcolo è stato effettuato per l'emoglobina. I risultati preliminari sono riportati nella pubblicazione n. 8 dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche.

5.1 Implementazione del potenziale Adapted Molecular Polarizability centres for Force fields (AMPF)

Il calcolo dell'energia potenziale, V , utilizzato per questo tipo di sistemi, è espresso come somma di un contributo intra-molecolare (V_{intra}) e un contributo inter-molecolare (V_{inter}). V_{inter} viene decomposto come somma di un contributo elettrostatico (V_{el}) e uno non-elettrostatico (V_{nel}). Il contributo elettrostatico è quindi rappresentato tramite semplici funzioni analitiche.

La candidata ha implementato una nuova formulazione per il calcolo della parte inter-molecolare non-elettrostatica sviluppato dal gruppo della Università di Perugia (Prof. F. Pirani) in collaborazione con il Gruppo di Chimica dell'Universidad de Barcelona (Spagna).

Questo nuovo potenziale si basa su una forma funzionale del potenziale Improved Lennard Jones

(ILJ) che aggiunge un altro parametro (β) alla formulazione classica Lennard Jones (LJ). La forma semi-empirica AMPF è un potenziale efficace che integra i contributi di scambio, induzione e di dispersione prendendo in considerazione alcuni centri di dispersione associati ad alcuni atomi o gruppi di atomi delle molecole considerate.

5.2 Sistema H₂O Liquida

Uno dei primi test, effettuati su larga scala, usando il potenziale semi-empirico AMPF, ha riguardato la formulazione della interazione intermolecolare di tipo Van der Waals (vdW) è tramite il potenziale ILJ, descritta precedentemente. La candidata ha determinato le proprietà energetiche e strutturale dell'acqua liquida usando DMC tramite DL_POLY. I risultati prodotti da questa linea di ricerca sono ampiamente mostrati nelle pubblicazioni n. 13, 19, 21 dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche.

5.3 Sistemi NMA-NMA, NMA-H₂O

La candidata ha studiato la natura del gruppo funzionale ammidico nel N-metilacetammide (NMA) per ottenere informazioni strutturali sulla molecola e comprendere le dinamiche di equilibrio dei legami a ponte d'idrogeno. Inoltre, lo studio del dimero NMA-H₂O ha portato alla conoscenza dell'interazioni non-bonded che sono state analizzate con metodi di dinamica molecolare.

Da notare che l'interazione fra NMA e H₂O fornisce un prototipo per la solvatazione dei gruppi peptidici in soluzione acquosa, in cui l'acqua può agire come un donatore rispetto al gruppo carbonilico e come accettore rispetto al gruppo ammidico. Di conseguenza, i legami idrogeno possono essere formati tra l'ossigeno del gruppo carbonilico della NMA e qualsiasi atomo di idrogeno della molecola d'acqua o tra l'atomo di ossigeno dell'acqua e l'atomo di H del legame NH. Allo stesso tempo, per i dimeri NMA sia legami idrogeno NH · · · O = C che CH · · · O = C svolgeranno un ruolo importante nella stabilizzazione dei complessi intermolecolari. I risultati prodotti da questa linea di ricerca sono pubblicati nella lista delle pubblicazioni del candidato con il n. 25, 31, 39, 50 (*questa ultima in fase di preparazione*)

6. Applicazioni a sistemi: K⁺-H₂O, Na⁺-H₂O, K⁺-C₆H₆, C₆F₆

Data l'importanza per la biochimica cellulare dei cationi alcalini, la struttura della sfera di idratazione dei metalli alcalini, in particolare ioni K⁺ e Na⁺, e la loro interazione con le molecole di acqua sono state oggetto di un gran numero di lavori teorici e sperimentali. Una delle caratteristiche più importanti e più studiate di questi sistemi è il numero di coordinazione dello ione in soluzione acquosa, un numero che, immaginando l'organizzazione delle molecole d'acqua rispetto allo ione come ad una sequenza di almeno due gusci sferici più o meno ordinati, indica quante molecole di acqua sono contenute in ciascuno di essi. La struttura di idratazione degli ioni in soluzione acquosa,

così come la selettività delle pompe ioniche, non può essere compresa senza un modello che riproduca con sufficiente accuratezza le interazioni ione-acqua. Infatti, è il complesso bilanciamento delle interazione ione-acqua e acqua-acqua, che garantisce il meccanismo di funzionamento della pompa sodio-potassio nelle cellule. La candidata ha in corso una collaborazione con il Prof. Sergio Vela (Universidad Autonoma de Madrid, Spagna) per lo studio della struttura d'idratazione degli ioni Na^+ e K^+ a livello di dettaglio atomico, tramite simulazioni di dinamica molecolare classica assistite da calcoli ab initio di struttura elettronica. A questo scopo si effettueranno dunque, simulazioni di dinamica dei sistemi ione-acqua liquida, ab initio e classiche, dove per queste ultime le interazioni intermolecolari saranno modellate con un approccio semiempirico, tramite potenziale Improved-Lennard-Jones (ILJ). Inoltre, al fine di acquisire elementi utili alla comprensione della dinamica di isomerizzazione dei sistemi ione - acqua sarà studiata la struttura di piccoli cluster ione-acqua con metodi DFT, usando i funzionali B3LYP e B97D corretto per la dispersione. I risultati prodotti da questa linea di ricerca sono pubblicati nelle pubblicazioni n. 27, 28, 30, 32, 33, 43, 44 dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche.

7. Calcoli di dinamica molecolare per lo studio della formazione di clatrati idratati catalizzata con dei tensioattivi (SDS)

La candidata attualmente sta eseguendo calcoli di Dinamica Molecolare classica, usando il codice DL_POLY con lo scopo di simulare la formazione dei clatrati idrati di metano coadiuvata dall'uso di tensioattivi, Sodium Dodecyl Sulphate (SDS). I primi risultati (articolo n. 40 dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche) hanno portato alla conclusione che il clatrato con metano in presenza di acqua e del catalizzatore SDS se distorce formando una gabbia che può intrappolare il CH_4 al suo interno. Questa caratteristica, invece, molto utile per l'immagazzinamento del CH_4 , non viene osservata nei clatrati di CO_2 .

La candidata intende proseguire con lo studio di questi sistemi variando il numero di molecole di tensioattivo coinvolte.

8. Calcolo accurato e sistematico di coefficienti di velocità per lo studio delle atmosfere e degli effetti della presenza di CO_2

La candidata in collaborazione con il Dr. A. Lombardi (Università degli Studi di Perugia) sta eseguendo il calcolo accurato e sistematico dei coefficienti di velocità delle transizioni vibrazionali stato-a-stato (cioè con dipendenza esplicita dallo stato quantico) nelle collisioni di due molecole di CO_2 . I modelli cinetici per lo studio delle atmosfere e degli effetti della presenza di CO_2 sul bilancio energetico come pure applicazioni tecnologiche quali la progettazione dell'ingresso in atmosfera di veicoli spaziali, richiedono infatti la disponibilità di basi di dati complete di coefficienti di velocità

stato a stato, per la descrizione dell'*energy transfer* vibrazionale. L'obiettivo dell'accuratezza dei coefficienti di velocità ottenuti è raggiunto per mezzo di una descrizione dettagliata dell'interazione intermolecolare CO₂-CO₂ (il cui calcolo non è fattibile con metodi quantistici), basata su approcci semiempirici, che utilizzano un'ampia fenomenologia proveniente da esperimenti di collisione.

I risultati prodotti da questa linea di ricerca sono pubblicati nelle pubblicazioni n. 34, 35, 38, 41, 46 dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche.

D. Alla progettazione di tecnologie chimiche

9. Attività di ricerca attuale : adsorbimento di H₂ sulle varie tipologie

L'immagazzinamento di idrogeno per mezzo di nuove forme allotropiche del carbonio, che sono materiali intrinsecamente leggeri, ha recentemente guadagnato l'attenzione come possibile tecnologia che consenta in futuro una economia basata sull'idrogeno. Il continuo aumento del livello di emissioni nocive e le severe regole ambientali hanno portato allo sviluppo di metodi più efficaci e sicuri di generazione di energia. Le celle a combustibile, che convertono l'energia chimica di un combustibile in energia elettrica attraverso una reazione chimica con l'ossigeno o un altro agente ossidante non emettono sostanze pericolose nel caso in cui il combustibile sia l'idrogeno, sono meno rumorose, hanno maggiore durata con meno manutenzione e sembrano essere una delle tecnologie più promettenti per la generazione di energia per il futuro. Il vantaggio principale dell'idrogeno come fonte di energia sta nel fatto che oltre ad essere uno degli elementi più abbondanti nell'universo, può essere facilmente rigenerato. L'idrogeno ha anche altre proprietà notevoli. Prima di tutto, è il combustibile più pulito e la sua combustione produce solo vapore acqueo e calore riducendo di conseguenza le emissioni di gas serra al minimo. Inoltre ha un valore di energia per unità di massa (141.84 MJ/kg) che è tre volte superiore a quello di altri combustibili chimici, quali gli idrocarburi liquidi (47.16 MJ/kg). Questa caratteristica è utile per soddisfare la domanda globale di energia, che continua a crescere in modo significativo. Tuttavia, il suo uso come combustibile è limitato da problemi di immagazzinamento e trasporto. L'idrogeno, infatti, è l'elemento più leggero presente sulla terra ed è molto volatile, per cui, nonostante il suo alto contenuto di energia, ha lo svantaggio che il volume di un kg di idrogeno è di circa 1000 m³ in condizioni standard. Questo enorme volume deve essere ridotto quando si cercano applicazioni pratiche. La liquefazione di idrogeno a temperature criogeniche è una delle tecniche di immagazzinamento, ma i contenitori per temperature criogeniche attualmente disponibili sono troppo ingombranti per essere utilizzati nei veicoli. Inoltre, per liquefare l'idrogeno è necessaria una grande quantità di energia, e ciò rende il sistema inefficiente.

9.1 Nanotubi (CNT)

Le tecnologie attualmente più studiate di immagazzinamento dell'idrogeno sono quelle basate sull'uso di nanotubi di carbonio. I nanotubi di carbonio possiedono diverse proprietà fisiche a seconda del loro diametro e chiralità. La grande disponibilità di spazio vuoto, in particolare all'interno dei nanotubi di carbonio a parete singola (Single Wall Nanotube, SWNT), può essere usata per l'immagazzinamento dell'idrogeno. In altre parole, i nanotubi di carbonio sembrano essere un'alternativa valida per l'immagazzinamento, dal momento che sono chimicamente stabili e hanno bassa densità di massa. Diversi esperimenti recenti hanno suggerito che i SWNT sono in grado di immagazzinare idrogeno a temperatura ambiente, per pressioni dell'idrogeno da moderate ad alte. A questo proposito, le simulazioni di dinamica molecolare basate su potenziali di interazione intermolecolari accurati hanno dimostrato di essere un potente strumento per descrivere l'adsorbimento e per ricavare informazioni energetiche ad una certa temperatura e per un insieme canonico.

La candidata, ha in corso delle ricerche in collaborazione con il Prof. Wang dell'Universidad Autonoma de Madrid (Spagna) per lo studio mediante dinamica molecolare del processo di adsorbimento di H_2 sulle varie tipologie di siti dei SWNT e secondo varie possibili orientazioni della molecola, allo scopo di stimare la capacità di immagazzinamento dei nanotubi di carbonio. I risultati prodotti da questa linea di ricerca stanno per essere pubblicati, (vedi la lista pubblicazioni della candidata, n. 51, *in fase finale di preparazione*).

9.2 Fogli di grafene

La candidata ha in corso una linea di ricerca, la cui base teorica è la stessa descritta al punto precedente, ma il cui scopo è valutare l'adsorbimento di H_2 su fogli di grafene, in collaborazione con il gruppo di Chimica Teorica dell'Universidad de Valencia con i professori Alfredo Sánchez de Merás e Jose Sánchez.

Prima di arrivare a dei risultati utili per le applicazioni, il primo studio ha riguardato l'interazione del coronene $C_{48}H_{12}$ (che può essere considerato la più piccola unità strutturale del grafene) con 7 molecole di H_2 . Questi calcoli sono stati fatti usando la dinamica molecolare classica e confrontando l'energia e la distanza di interazione con quelle derivate da calcoli di struttura elettronica "first principles". I risultati di questo studio preliminare sono riportati nella pubblicazione num. 42.

Verificata la bontà di questo approccio combinato siamo passati ad una ottima approssimazione del sistema reale (layer di grafene e alcune centinaia di molecole di H_2 fino alla saturazione della superficie) per valutare la densità gravimetrica (%wt) del sistema. Abbiamo eseguito dei calcoli di dinamica molecolare classica e dei calcoli DFT per valutare la percentuale di molecole di H_2 adsorbite sul grafene.

I risultati ottenuti da questi ultimi calcoli sono stati sottomessi al J. Chem. Phys. C (vedere pubblicazione n. 45 dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche).

10. Calcoli statistici Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus di costanti di velocità microcanoniche per reazioni complesse multicanale

In collaborazione con i Prof. Marzio Rosi (Università degli Studi di Perugia) e il Dr. D. Skouteris (Scuola Normale Superiore, Pisa), il candidato ha eseguito calcoli statistici RRKM su reazioni multicanale - basati su nuovi calcoli *ab initio* delle relative superfici di energia potenziale (sistemi $CN + CH_3NH_2$ e metanimmina). Tali sistemi reattivi sono di notevole importanza in astrochimica e in particolare nella chimica della atmosfera di Titano e nell'evoluzione chimica delle comete. I *branching ratio* statistici sono stati confrontati con quelli (parziali) ottenuti in esperimenti a fasci molecolari incrociati. La rilevanza in astrochimica di questi due studi è testimoniata dalla pubblicazioni n. 48, 49 dell'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche (*in fase finale di preparazione*).

PUBBLICAZIONE SCIENTIFICHE DELLA DOTT.SSA FAGINAS-LAGO, MARIA NOELIA

(con il numero di citazioni SCOPUS, ISI-WOS e Google Scholar all'interrogazione fatta in data 10/03/2015)

1. **A. Riganelli, N. Faginas Lago**

Foreword

Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering 2, 310 (2002).

2. **N. Faginas-Lago, A. Laganà**

Initial value Semiclassical approaches to reactive and non reactive transition probabilities
Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 2658, 357-365 (2003).

cited 0 times (SCOPUS), cited 0 times (ISI-WOS), cited 14 times (Google Scholar)

3. **A. Laganà, S. Crocchianti, N. Faginas-Lago, L. Pacifici and G. Ferraro**

A non orthogonal coordinate approach to atom diatom parallel reactive scattering calculations
Collection of Czechoslovak Chemical Communications 68, 307-330 (2003).

cited 8 times (SCOPUS), cited 8 times (ISI-WOS), cited 14 times (Google Scholar)

4. **N. Faginas Lago, A. Laganà, A. Riganelli**

Quantum vs Semiclassical initial value representation probabilities for non reactive systems
International Journal Quantum Chemistry 96, 547-553 (2004).

cited 2 times (SCOPUS), cited 1 times (ISI-WOS), cited 2 times (Google Scholar)

5. **N. Faginas Lago, A. Laganà**

Foreword

Future Generation Computer Systems 20, 701-702 (2004).

cited - times (SCOPUS), cited 0 times (ISI-WOS), cited 14 times (Google Scholar)

6. **N. Faginas Lago, A. Laganà, E. Garcia and X. Guimenez**

Thermal rate coefficients for the N + N₂ reaction: Quasiclassical, Semiclassical and Quantum calculations

Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 3480, 1083-1092 (2005).

cited 2 times (SCOPUS), cited 2 times (ISI-WOS), cited 1 times (Google Scholar)

7. **N. Faginas Lago, A. Laganà**

A comparison of semiclassical IVR and exact quantum collinear atom diatom transition probabilities for mixed reactive and non reactive regimes

American Institute of Physics (AIP) Conference Proceedings 762, 920-925 (2005).

cited 1 times (SCOPUS), cited 0 times (ISI-WOS), cited 1 times (Google Scholar)

8. **F. Filomia, N. Faginas Lago**

A Simplified Myoglobin Model for Molecular Dynamics Calculations

Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 3980, 731-737 (2006).

cited 0 times (SCOPUS), cited 0 times (ISI-WOS), cited 14 times (Google Scholar)

9. **N. Faginas-Lago, A. Laganà**

A semiclassical initial value representation approach to N+N₂ rate coefficient

Lecture Series on Computer and Computational Sciences 7A-B, 297-300 (2006)

cited - times (SCOPUS), cited 0 times (ISI-WOS), cited 14 times (Google Scholar)

10. **N. Faginas Lago, A. Laganà**

Thermal rate coefficients for the N + N₂ reaction: quantum and semiclassical calculations

Semiclassical and Other Methods for Understanding Molecular Collisions and Chemical Reactions, S. Sen, D. Sokolovski and J. N. L. Connor (Eds) . 150-153 (2006). ISBN:

0-9545289-3-X

11. **N. Faginas Lago, A. Laganà, R. Gargano and R. P. R. Barreto**

On the semiclassical initial value calculation of the thermal rate coefficients for the N + N₂ reaction

The Journal of Chemical Physics 125, 114311-6 (2006)

cited 8 times (SCOPUS), cited 5 times (ISI-WOS), cited 11 times (Google Scholar)

12. N. Faginas Lago, Fermin Huarte Larrañaga

Quantum vs semiclassical dynamics approaches from highly symmetric to asymmetric reactions”

Conference proceedings of the selected papers of the Fifth International Conference on “Computational science and its applications” 1, 441-443 (2007).

cited 1 times (SCOPUS), cited 0 times (ISI-WOS), cited 1 times (Google Scholar)

13. N. Faginas Lago, A. Laganà, M. Paolantoni, M. Alberti

Structural order in water: comparison between the spectral analysis of Raman data and molecular dynamics results

American Institute of Physics (AIP) Conference Proceedings 963, (2 A) 651-654 (2007).

cited - times (SCOPUS), cited 0 times (ISI-WOS), cited 14 times (Google Scholar)

14. N. Faginas Lago, A. Laganà, F. Huarte-Larrañaga

Full dimensional quantum versus semiclassical reactivity for the bent transition state reaction $N + N_2$

Chemical Physics Letters 464, 249–255 (2008).

cited 6 times (SCOPUS), cited 6 times (ISI-WOS), cited 7 times (Google Scholar)

15. A. Laganà, N. Faginas Lago, S. Rampino, F. Huarte-Larrañaga, E. Garcia

Thermal rate coefficients in collinear versus bent transition state reactions: the $N + N_2$ case study

Physica Scripta 78, 058116 (2008).

cited 5 times (SCOPUS), cited 5 times (ISI-WOS), cited 7 times (Google Scholar)

16. N. Faginas Lago

Implementation of a Semiclassical Initial Value representation Code on the Grid to Calculate Rate Coefficients of Atom diatom reaction

Chemistry and Material Science Applications on Grid Infrastructures, S. Cozzini and A. Laganà (Eds). 207-216 (2008). ISBN: 92-95003-42-X

17. A. Costantini, N. Faginas-Lago, A. Laganà and F. Huarte-Larrañaga

A Grid Implementation of Direct Semiclassical Calculations of Rate Coefficients

Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 5593, 93–103 (2009).

cited 1 times (SCOPUS), cited 1 times (ISI-WOS), cited 1 times (Google Scholar)

18. A. Costantini, N. Faginas-Lago, A. Laganà and F. Huarte-Larrañaga

A Grid Implementation of Direct Quantum Calculations of Rate Coefficients

Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 5593, 104–114 (2009).

cited 1 times (SCOPUS), cited 1 times (ISI-WOS), cited 1 times (Google Scholar)

19. N. Faginas Lago, F. Huarte-Larrañaga, M. Alberti

On the suitability of the ILJ potential to match different formulations of the electrostatic potential for liquid water simulations

The European Physical Journal D (Atomic, Molecular, Optical & Plasma Physics) 55, 75–85 (2009).

cited 29 times (SCOPUS), cited 30 times (ISI-WOS), cited 34 times (Google Scholar)

20. A. Laganà, C. Manuali, N. Faginas Lago, O. Gervasi, S. Crocchianti, A. Riganelli, S. Shanze

From Computer Assisted to Grid Empowered Teaching and Learning Activities in Higher Level Chemistry Education

Innovative Methods in Teaching and Learning Chemistry in Higher Education, I. Eilks and B. Byers (Eds). 153-190 (2009). ISBN: 978-1-84755-958-6

cited - times (SCOPUS), cited 5 times (ISI -WOS), cited 9 times (Google Scholar)

21. M. Paolantoni, N. Faginas-Lago, M. Alberti, A. Laganà

Tetrahedral ordering in water: Raman profiles and their temperature dependence

The Journal of Physical Chemistry A 113, 15100-15105 (2009).

cited 23 times (SCOPUS), cited 25 times (ISI-WOS), cited 32 times (Google Scholar)

22. N. Faginas-Lago, A. Costantini, F. Huarte-Larrañaga

Direct calculation of rate coefficients on the grid: exact quantum versus semiclassical results for $N+N_2$

International Journal Quantum Chemistry 110, 422-431 (2010).

cited 1 times (SCOPUS), cited 0 times (ISI -WOS), cited 1 times (Google Scholar)

23. S. Pallottelli, S. Tasso, N. Pannacci, A. Costantini and N. Faginas-Lago

Distributed and collaborative Learning objects repositories on grid networks

Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 6019, 29–40 (2010).

cited 4 times (SCOPUS), cited 4 times (ISI-WOS), cited 8 times (Google Scholar)

24. A. Laganà, S. Rampino, C. Manuali, O. Gervasi, A. Costantini and N. Faginas Lago

COMPChem: Progress Towards GEMS a Grid Empowered Molecular Simulator and Beyond

Journal of Grid Computing 8, 571–586 (2010).

cited 32 times (SCOPUS), cited 38 times (ISI-WOS), cited 47 times (Google Scholar)

25. N. Faginas Lago, M. Alberti, A. Laganà, F. Pirani

A portable intermolecular potential for molecular dynamics studies of NMA-NMA and NMA-H₂O aggregates

Physical Chemistry Chemical Physics 13, 8422–8432 (2011).

cited 15 times (SCOPUS), cited 16 times (ISI-WOS), cited 20 times (Google Scholar)

26. N. Faginas Lago, F. Huarte-Larrañaga

Quantum and semiclassical approaches to evaluate rate coefficients: Implementation of final state projections

Science and Supercomputing in Europe, Research Highlights S. Monfardini-CINECA (Eds). 10 (2011). ISBN: 978-88-86037-25-9

27. M. Albertí, N. Faginas Lago, F. Pirani

Ar Solvation Shells in K⁺-HFBz: From Cluster Rearrangement to Solvation Dynamics

The Journal of Physical Chemistry A 115, 10871–10879 (2011).

cited 8 times (SCOPUS), cited 8 times (ISI-WOS), cited 10 times (Google Scholar)

28. M. Albertí, N. Faginas Lago, F. Pirani

Benzene water interaction: From gaseous dimers to solvated aggregates

Chemical Physics 399, 232-239 (2012).

cited 15 times (SCOPUS), cited 18 times (ISI-WOS), cited 19 times (Google Scholar)

29. S. Rampino, N. Faginas lago, A. Laganà, F. Huarte-Larrañaga

An Extension of the Grid Empowered Molecular Simulator to Quantum Reactive Scattering

Journal of Computational Chemistry 2012, 33, 708–714 (2012).

cited 4 times (SCOPUS), cited 4 times (ISI-WOS), cited 4 times (Google Scholar)

30. M. Albertí, N. Faginas Lago

Ion Size Influence on the Ar Solvation Shells of M⁺–C₆F₆ Clusters (M⁺ = Na, K, Rb, Cs)

The Journal of Physical Chemistry A 116, 3094–3102 (2012).

cited 6 times (SCOPUS), cited 7 times (ISI-WOS), cited 10 times (Google Scholar)

31. N. Faginas -Lago, A. Lombardi, A. Laganà, F. Pirani, S. Falcinelli

A bond-bond portable approach to intermolecular interactions: simulations for N-methylacetamide and carbon dioxide dimers

Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 7333, 387–400 (2012).

cited 6 times (SCOPUS), cited 8 times (ISI-WOS), cited 9 times (Google Scholar)

32. M. Albertí, N. Faginas Lago

Competitive solvation in the $K^+-(C_6H_6)_n-(H_2O)_m$ ($n = 1-4$; $m = 1-6$) aggregates

The European Physical Journal D (Atomic, Molecular, Optical & Plasma Physics) 1, 67-73 (2013).

cited 7 times (SCOPUS), cited 6 times (ISI-WOS), cited 9 times (Google Scholar)

33. N. Faginas -Lago, M. Albertí, A. Laganà, A. Lombardi

Water $(H_2O)_m$ or benzene $(C_6H_6)_n$ aggregates to solvate the K^+ ?

Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 7971, 1-15 (2013).

cited 3 times (SCOPUS), cited 5 times (ISI-WOS), cited 8 times (Google Scholar)

34. A. Lombardi, A. Laganà, F. Pirani, F. Palazzetti, N. Faginas -Lago

Carbon oxides in gas flows and earth and planetary atmospheres: State-to-state simulations of energy transfer and dissociation reactions

Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 7972, 17-31 (2013)

cited 3 times (SCOPUS), cited 4 times (ISI-WOS), cited 7 times (Google Scholar)

35. S. Falcinelli, M. Rosi, P. Candori, F. Vecchiocattivi, A. Bartocci, A. Lombardi, N. Faginas Lago, F. Pirani

Modeling the intermolecular interactions and characterization of the dynamics of collisional autoionization processes

Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 7971, 69-83 (2013)

cited 5 times (SCOPUS), cited 5 times (ISI-WOS), cited 8 times (Google Scholar)

36. N. Faginas Lago, A. Lombardi, L. Pacifici, A. Costantini,

Design and implementation of a Grid application for direct calculations of reactive rates

Computational and Theoretical Chemistry 1022, 103-107 (2013)

cited 4 times (SCOPUS), cited 1 times (ISI-WOS), cited 5 times (Google Scholar)

37. L. Pacifici, M. Verdicchio, N. Faginas Lago, A. Lombardi, A. Costantini

A High-Level Ab Initio Study of the N_2+N_2 Reaction Channel

Journal of Computational Chemistry 34, 2668-2676 (2013)

cited 5 times (SCOPUS), cited 4 times (ISI-WOS), cited 6 times (Google Scholar)

38. A. Lombardi, N. Faginas-Lago, L. Pacifici, A. Costantini

Modeling of Energy Transfer From Vibrationally Excited CO₂ Molecules: Cross Sections and Probabilities for Kinetic Modeling of Atmospheres, Flows, and Plasmas

The Journal of Physical Chemistry A 117, 11430–11440 (2013)

cited 5 times (SCOPUS), cited 4 times (ISI-WOS), cited 7 times (Google Scholar)

39. **N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Costantini, A. Laganà, A. Lombardi, L. Pacifici**
An innovative synergistic Grid approach to the computational study of protein aggregation mechanisms
Journal of Molecular Modeling 20(7), 2226-2235 (2014)
cited 3 times (SCOPUS), cited 1 times (ISI-WOS), cited 4 times (Google Scholar)
40. **N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Laganà, A. Lombardi, L. Pacifici, A. Costantini**
The molecular stirrer catalytic effect in methane ice formation
Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 8579, (I) 585-600 (2014).
41. **A. Lombardi, N. Faginas-Lago, A. Laganà**
Grid Calculation Tools for Massive Applications of Collision Dynamics Simulations: Carbon Dioxide Energy Transfer
Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 8579, (I) 627-639 (2014).
42. **Bin Yeamin, N. Faginas-Lago, M. Albertí, I. G. Cuesta, J. Sánchez-Marín, A. M. J. Sánchez de Merás**
Multi-scale Theoretical Investigation of Molecular Hydrogen Adsorption over Graphitic Systems: Coronene As a Case Study
RSC Advances 4, 54447–54453 DOI: 10.1039/C4RA08487J (2014).
43. **N. Faginas-Lago, A. Lombardi, M. Albertí, G. Grossi**
Accurate analytic intermolecular potential for the simulation of Na⁺ and K⁺ ion hydration in liquid water
Journal of Molecular Liquids 204, 192-197 DOI: 10.1016/j.molliq.2015.01.029 (2015).
44. **N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Laganà, A. Lombardi**
Ion-water cluster molecular dynamics using a semiempirical intermolecular potential
Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 9156, (II) 355-370 DOI: 10.1007/978-3-319-21407-8_26 (2015).
45. **L. Pacifici, M. Rosi, N. Faginas-Lago, D. Stranges, S. Falcinelli, N. Balucani**
A theoretical investigation of 1-butanol pyrolysis

46. A. Lombardi, N. Faginas-Lago, L. Pacifici, G. Grossi

Energy transfer upon collision of selectively excited CO₂ molecules: State-to-state cross sections and probabilities for modeling of atmospheres and gaseous flows
Journal of Chemical Physics 143, 034307 DOI: 10.1063/1.4926880 (2015).

47. Bin Yeamin, N. Faginas-Lago, M. Albertí, I. G. Cuesta, J. Sánchez-Marín, A. M. J. Sánchez de Merás

Multilayer Hydrogen Adsorption on Graphene from multi-scale simulation modelling
sottomesso al J. Chem. Phys. C (2015).

48. G. El Dib, C. Sleiman, A. Canosa, D. Skouteris, N. Balucani, M. Rosi, N. Faginas-Lago

A Low temperature kinetics and theoretical study of the CN + CH₃NH₂ reaction
da sottomettere al Phys. Them. Chem. Phys. (2015).

49. M. Rosi, S. Falcinelli, N. Faginas-Lago, N. Balucani, D. Skouteris

A theoretical study study of dimerization of neutral, ionized and protonated methamine and consequences for the upper atmosphere of titan
da sottomettere al J. Phys. Chem. A (2015).

50. N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Lombardi

Solutions of Aqueous N-methyacetamide: A molecular dynamics study
in preparazione (2015).

51. N. Faginas-Lago, D. Oksuz, F. Huarte-Larrañaga, Y. Wang, M. Alcamí, F. Martín

Adsorption of Hydrogen Molecules on Carbon Nanotubes using Quantum Chemistry and Molecular Dynamics
in preparazione (2015).

