

Peer-reviewed journal articles

1)-A Non-Radiative approach to single-mode dielectric resonators

Annino G.; Cassettari M.; Martinelli M.; van Bentum P.J.M.

Applied magnetic resonance 24 (2003): 157–175.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39164>

info:cnr-pdr/source/autori:Annino G., Cassettari M., Martinelli M., van Bentum P.J.M./titolo:A Non-Radiative approach to single-mode dielectric resonators/

2)-A simple submillimeter wave reflecting setup for open dielectric resonators excitation

Annino G.; Cassettari M.; Martinelli M.; van Bentum P.J.M.subjectdielectric resonatorssubjectnonradiative mirror

Review of scientific instruments 74 (2003): 4536–4538.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39165>

info:cnr-pdr/source/autori:Annino G., Cassettari M., Martinelli M., van Bentum P.J.M./titolo:A simple submillimeter wave reflecting setup for open dielectric resonators excitation/

3)-ZST type material for dielectric resonators and substrates for hybrid integrated circuits

Ioachim A.; Toacsan M.I.; Banciu M.G.; Nedelcu L.; Stoica G.; Annino G.; Cassettari M.; Martinelli M.; Ramer R.

Journal of Optoelectronics and Advanced Materials (Print) 5 (2003): 1395–1398.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39166>

info:cnr-pdr/source/autori:Ioachim A., Toacsan M.I., Banciu M.G. , Nedelcu L. , Stoica G., Annino G., Cassettari M., Martinelli M., Ramer R./titolo:ZST type material for dielectric resonators and substrates for hybrid integrated circuits/

4)-Theoretical Conformational Analysis for Neurotransmitters in the Gas Phase and in Aqueous Solution. Norepinephrine

Nagy* P.I.; Alagona* G.; Ghio C.; Takács-Novák K.subjectFEP simulationssubjectligand dockingsubjectb-adrenergic receptosubjectcharge parameterssubjectPCM-SCIPCM

Journal of the American Chemical Society (Print) 125 (2003): 2770–2785.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39168>

info:cnr-pdr/source/autori:Nagy* P.I., Alagona* G., Ghio C., Takács-Novák K./titolo:Theoretical Conformational Analysis for Neurotransmitters in the Gas Phase and in Aqueous Solution. Norepinephrine/

5)-Quantum Mechanical Study of Stereoselectivity in the Oxazaborolidine-Catalysed Reduction of Acetophenone

Alagona* G.; Ghio C.; Persico M.; Tomasi S.subjectCatalisi omogeneasubjectcatalizzatore CBSsubjectab initiosubjectAM1subjectDFT

Journal of the American Chemical Society (Print) 125 (2003): 10027–10039.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39169>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona* G., Ghio C., Persico M., Tomasi S./titolo:Quantum Mechanical Study of Stereoselectivity in the Oxazaborolidine-Catalysed Reduction of Acetophenone/

6)-The Intramolecular Mechanism for the Second Proton Transfer in Triosephosphate Isomerase (TIM): A QM/FE Approach

Alagona G.; Ghio* C.; Kollman P.A.subjectab initio Hartree-Fock calculationssubjectMP2 correlation correctionssubjectreaction mechanismsubjectfree energy perturbationsubjectmolecular dynamics, enzyme field

Journal of computational chemistry 24 (2003): 46–56124.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39170>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G., Ghio* C., Kollman P.A./titolo:The Intramolecular Mechanism for the Second Proton Transfer in Triosephosphate Isomerase (TIM): A QM/FE Approach/

7)-Transferable Group Contributions for a Variety of Chemical Phenomena and Compound

Alagona* G.; Campanile S.; Ghio C.; Giolitti A.; Monti S.subjectTransferable localized orbitalssubjectChemical fragmentssubjectElectrostatic potential mapssubjectAtomic charges

Theoretical Chemistry accounts (Print) 110 (2003): 446–459.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39171>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona* G., Campanile S., Ghio C., Giolitti A., Monti S./titolo:Transferable Group Contributions for a Variety of Chemical Phenomena and Compound/

8)-Cholic Acid Derivatives Containing both 2-Naphthylcarbamate and 3,5-Dinitrophenylcarbamate Groups: A Combined Circular Dichroism-Molecular Mechanics Approach to the Definition of their Molecular Conformation

Alagona G.; Ghio C.; Iuliano* A.; Monti* S.; Pieraccini I.; Salvadori P.subjectCircular DichroismsubjectMolecular DynamicssubjectCholic acidssubjectConformerssubjectChiral auxiliaries

Journal of organic chemistry 68 (2003): 3145–3157.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39172>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G., Ghio C., Iuliano* A., Monti* S., Pieraccini I., Salvadori P./titolo:Cholic Acid Derivatives Containing both 2-Naphthylcarbamate and 3,5-Dinitrophenylcarbamate Groups: A Combined Circular Dichroism-Molecular Mechanics Approach to the Definition of their Molecular Conformation/

9)-Relaxed States of Alfvenic Turbulence

KRISHAN V; NOCERA LsubjectAlfvenic turbulencesubjectsolitonssubjectwave interactionssubjectvariational principlesubjectself-organization

Physics letters. B (Print) 315 (2003): 389–394.

[https://dx.doi.org/10.1016/S0375-9601\(03\)01105-8](https://dx.doi.org/10.1016/S0375-9601(03)01105-8)

10)-Thermodynamic study of heptane + amine mixtures.

Matteoli E.; Lepori L.; Spanedda A.

Fluid phase equilibria 212 (2003): 41–52.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39197>

info:cnr-pdr/source/autori:Matteoli E., Lepori L., Spanedda A./titolo:Thermodynamic study of heptane + amine mixtures./

11)-Volumetric study of (2-methoxyethanol+tetrahydrofuran+cyclohexane) at T=298.15K

Conti G.1; Gianni P.2; Lepori L.3; Matteoli E.4subjectexcess
volumesubjectmixturesubjectdensitysubjectinteractionssubjectmethoxyethanol

Journal of Chemical Thermodynamics 35 (2003): 503–518.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39198>

info:cnr-pdr/source/autori:Conti G.1, Gianni P.2, Lepori L.3, Matteoli E.4/titolo:Volumetric study of (2-methoxyethanol+tetrahydrofuran+cyclohexane) at T=298.15K/

12)-Near-field light emission from nano- and micrometric complex structures

Pieruccini M. 1; Savasta S. 2; Girlanda R. 3; Iotti R.C. 4; Rossi F. 5subjectNear-
FieldsubjectNano-Structuressubjectemissionsubjectscatteringsubjectoptics

Applied physics letters 83 (2003): 2480–2482.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39219>

info:cnr-pdr/source/autori:Pieruccini M. 1, Savasta S. 2, Girlanda R. 3, Iotti R.C. 4, Rossi F. 5/titolo:Near-field light emission from nano- and micrometric complex structures/

13)-Computational Quantum Chemistry in terms of multicenter Slater-type orbitals: entirely numerical procedure for the accurate evaluation of the basic integrals

Guidotti C.; Salvetti O.; Durante N.; Lamanna U.T.; Arrighini G.P.subject.

International journal of quantum chemistry 93 (2003): 59–71.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39232>

info:cnr-pdr/source/autori:Guidotti C., Salvetti O., Durante N., Lamanna U.T., Arrighini G.P./titolo:Computational Quantum Chemistry in terms of multicenter Slater-type orbitals: entirely numerical procedure for the accurate evaluation of the basic integrals/

14)-Relativistic effects on the electric polarizabilities and their geometric derivatives for hydrogen halides and dihalogens - A Dirac-Hartree-Fock study.

Pecul M.; Rizzo A.

Chemical physics letters (Print) 370 (2003): 578–588.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39240>

info:cnr-pdr/source/autori:Pecul M., Rizzo A./titolo:Relativistic effects on the electric polarizabilities and their geometric derivatives for hydrogen halides and dihalogens - A Dirac-Hartree-Fock study./

15)-Sternheimer shieldings and EFG polarizabilities: a density-functional theory study

Rizzo A.; Ruud K.; Helgaker T.; Salek P.; Ågren H.; Vahtras O.

Chemical physics letters (Print) 372 (2003): 377–385.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39241>

info:cnr-pdr/source/autori:Rizzo A., Ruud K., Helgaker T., Salek P., Ågren H., Vahtras O./titolo:Sternheimer shieldings and EFG polarizabilities: a density-functional theory study/

16)-On the electric field gradient induced birefringence and electric quadrupole moment of CO, N₂O and OCS.

Coriani S.; Halkier A.; Jonsson D.; Gauss J.; Rizzo A.; Christiansen O.

118 (2003): 7329–7339.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39243>

info:cnr-pdr/source/autori:Coriani S., Halkier A., Jonsson D., Gauss J., Rizzo A., Christiansen O./titolo:On the electric field gradient induced birefringence and electric quadrupole moment of CO, N₂O and OCS./

17)-The Cotton-Mouton effect of furan and its homologues in the gas phase, for the pure liquids and in solution.

Cappelli C.; Rizzo A.; Mennucci B.; Tomasi J.; Cammi R.; Rikken G. L. J. A.; Mathevet R.; Rizzo C.

118 (2003): 10712–10724.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39244>

info:cnr-pdr/source/autori:Cappelli C., Rizzo A., Mennucci B., Tomasi J., Cammi R., Rikken G. L. J. A., Mathevet R., Rizzo C./titolo:The Cotton-Mouton effect of furan and its homologues in the gas phase, for the pure liquids and in solution./

18)-Density dependence of the electric-field-gradient induced birefringence of the helium, neon and argon gases.

Marchesan D.; Coriani S.; Rizzo A.

Molecular physics (Print) 101 (2003): 1851–1865.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39246>

info:cnr-pdr/source/autori:Marchesan D., Coriani S., Rizzo A./titolo:Density dependence of the electric-field-gradient induced birefringence of the helium, neon and argon gases./

19)-Ab initio calculation of the refractivity and hyperpolarizability second virial coefficients of the neon gas.

Hättig C.; Cacheiro L.J.; Fernández B.; Rizzo A.

Molecular physics (Print) 101 (2003): 1983–1995.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39247>

info:cnr-pdr/source/autori:Hättig C., Cacheiro L.J., Fernández B. and Rizzo A./titolo:Ab initio calculation of the refractivity and hyperpolarizability second virial coefficients of the neon gas./

20)-Raman Optical Activity spectra: basis set and electron correlation effects.

Pecul M.; Rizzo A.

Molecular physics (Print) 101 (2003): 2073–2081.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39248>

info:cnr-pdr/source/autori:Pecul M., Rizzo A./titolo:Raman Optical Activity spectra: basis set and electron correlation effects./

21)-Relativistic effects on Sternheimer shieldings and the polarizabilities of the electric field gradient at the nucleus.

Rizzo, A; Ruud, K.; Norman, P.

633 (2003): 163–176.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39249>

info:cnr-pdr/source/autori:Rizzo, A; Ruud, K.; Norman, P./titolo:Relativistic effects on Sternheimer shieldings and the polarizabilities of the electric field gradient at the nucleus./

22)-Jones birefringence in gases. Ab initio electron correlated results for atoms and linear molecules.

Rizzo A.; Coriani S.

119 (2003): 11064–11079.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39250>

info:cnr-pdr/source/autori:Rizzo A., Coriani S./titolo:Jones birefringence in gases. Ab initio electron correlated results for atoms and linear molecules./

23)-A versatile multipurpose scanning probe microscope

Cefali E.; Patané S.; Gucciardi PG.; Labardi M.; Allegrini M.

Journal of microscopy (Print) 210 (2003): 262–268.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39257>

info:cnr-pdr/source/autori:Cefali E., Patané S., Gucciardi PG., Labardi M., Allegrini M./titolo:A versatile multipurpose scanning probe microscope/

24)-Improved microwave Hall effect measurement method

Prati E.; Faralli S.; Martinelli M.; Annino G.

Review of scientific instruments 74 (2003): 154–159.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/39261>

info:cnr-pdr/source/autori:Prati E., Faralli S., Martinelli M., Annino G./titolo:Improved microwave Hall effect measurement method/

25)-Phase Space Holes in Nonperiodic Plasmas

FIJALKOW E; NOCERA Lsubjectelectron holessubjectVlasov equationssubjectBGK wavessubjectnumerical simulationssubjectlong time equilibria

Journal of plasma physics (Print) 69 (2003): 93–108.

<https://dx.doi.org/10.1017/S0022377803002101>

26)-Oxygen K-edge near edge X-ray absorption fine structures of O and OH overlayers on Pt(111)

Nagasaka M.; Nakai I.; Kondoh H.; Ohta T.; Carravetta V.subjectexperimentssubjecttheorysubjectNEXAFSsubjectXASsubjectOH/Pt(111)
Chemical physics letters (Print) 375 (2003): 419–424.
<http://www.cnr.it/prodotto/i/39292>

info:cnr-pdr/source/autori:Nagasaka M., Nakai I., Kondoh H., Ohta T., Carravetta V./titolo:Oxygen K-edge near edge X-ray absorption fine structures of O and OH overlayers on Pt(111)/

27)-Crystallization of Poly(butylene terephthalate)

M.L. Di Lorenzo; M.C. Righetti

Polymer engineering and science (Online) 43 (2003): 1889–1894.

<http://www.cnr.it/prodotto/i/170001>

info:cnr-pdr/source/autori:M.L. Di Lorenzo, M.C. Righetti/titolo:Crystallization of Poly(butylene terephthalate)/

28)-Complexity in the Sherrington-Kirkpatrick model in the annealed approximation

Crisanti, A; Leuzzi, L; Parisi, G; Rizzo, TsubjectSPIN-GLASS MODELsubjectRANDOM-ENERGY MODELsubjectMETASTABLE STATESsubjectWEIGHTED AVERAGESsubjectSOLVABLE MODELsubjectTAP EQUATIONSsubjectSUPER-FIELDsubjectSUPERSYMMETRY

Physical review. B, Condensed matter and materials physics 68 (2003): 174401.

<https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.68.174401>

29)-The complexity of the spherical p-spin spin glass model, revisited

Crisanti, A; Leuzzi, L; Rizzo, TsubjectMETASTABLE STATES; SOLVABLE MODEL; SUPER-COOLED LIQUIDS; TAP EQUATIONS

The European physical journal. B, Condensed matter physics (Print) 3 (2003): 129–136.

<https://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2003-00325-x>

30)-Combining theory and experiment to study the photooxidation of polyethylene and polypropylene

Bertoldo, M; Bronco, S; Cappelli, C; Gagnoli, T; Andreotti, LsubjectOLARIZABLE CONTINUUM MODELsubjectLOW-DENSITY

POLYETHYLENEsubjectHETEROGENEOUS OXIDATION-KINETICSsubjectTHERMALLY-INITIATED OXIDATIONsubjectTHERMOOXIDATIVE DEGRADATIONsubjectINFRARED INTENSITIESsubjectSOLID-

STATEsubjectSPECTROSCOPYsubjectFREQUENCIESsubjectPOLYOLEFINS

The journal of physical chemistry. B 107 (2003): 11880–11888.

<https://dx.doi.org/10.1021/jp035427h>

31)-Modification of surface and mechanical properties of polyethylene by photo-initiated reactions

Fallani, F; Ruggeri, G; Bronco, S; Bertoldo, Msubjectphotocrosslinking; polyethylene; mechanical properties

Polymer degradation and stability 82 (2003): 257–261.

[https://dx.doi.org/10.1016/S0141-3910\(03\)00219-2](https://dx.doi.org/10.1016/S0141-3910(03)00219-2)

32)-Gas-phase photoemission investigation of diethynylthiophene: Experiment and theory

Giovanni Polzonetti/1; Giorgio Contini/2; Vincenzo Carravetta/3; Claudio Lo Sterzo/4; Antonella Ricci/4; | Angelica Ferri/1; Stefano Stranges/5; Monica de Simone/1subjectexperimentssubjecttheorysubjectNEXAFSsubjectXASsubjectDiethynyl-Thiophene

The journal of physical chemistry. A 107 (2003): 6777–6784.

<https://dx.doi.org/10.1021/jp021777c>

=====

Other publications (journals without peer review, book reviews,etc.)

1)-Birefringences: a challenge for both theory and experiment

Rizzo; A.

the International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2003 (ICCMSE 2003), Kastoria, Grecia, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/88181>

info:cnr-pdr/source/autori:Rizzo, A./congresso_nome:the International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2003 (ICCMSE 2003)/congresso_luogo:Kastoria, Grecia/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

2)-Contactless microwave hall effect transport in ZnSe

Prati E; Faralli S; Annino G; Martinelli M

33RD EUROPEAN MICROWAVE CONFERENCE, Munich, Germany, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/88228>

info:cnr-pdr/source/autori:Prati E, Faralli S, Annino G, Martinelli M/congresso_nome:33RD EUROPEAN MICROWAVE CONFERENCE/congresso_luogo:Munich, Germany/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

3)-Optical dipole trap for rubidium atoms

A.Fioretto; C.A.Massa; M.Mazzoni; C.Gabbanini

INFM Meeting, Genova, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116359>

info:cnr-pdr/source/autori:A.Fioretto, C.A.Massa, M.Mazzoni and C.Gabbanini/congresso_nome:INFM Meeting/congresso_luogo:Genova/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

4)-Single-mode dielectric resonators for high field EMR

G.Annino; M.Cassettari; M.Martinelli; P.J.M. van Bentum

11th Meeting of the Benelux EPR Society 2003, Book of Abstract, Nijmegen, Holland, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116393>

info:cnr-pdr/source/autori:G.Annino, M.Cassettari, M.Martinelli, and P.J.M. van Bentum/congresso_nome:11th Meeting of the Benelux EPR Society 2003, Book of Abstract/congresso_luogo:Nijmegen, Holland/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

5)-Complex response of magnetic resonance spectrometers

G. Annino; M. Cassettari; M. Fittipaldi; M. Martinelli

EPR and NMR at High Field: Applications to Magnetic Systems and Superconductors, Pisa, Italy, 23 ? 25 July 2003,, Pisa, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116395>

info:cnr-pdr/source/autori:G. Annino, M. Cassettari, M. Fittipaldi, and M. Martinelli,/congresso_nome:EPR and NMR at High Field: Applications to Magnetic Systems and Superconductors, Pisa, Italy, 23 ? 25 July 2003,/congresso_luogo:Pisa/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

6)-Quantum Mechanical Study of Stereoselectivity in the Oxazaborolidine-Catalysed Reduction of Acetophenone

Alagona G.; Ghio C.; Persico M.; Tomasi S.

Modelling chemical reactivity: from gas-phase to solution and enzymes. An international conference in honor of Professor Jean-Louis Rivail - 16-18 luglio, Nancy (France), 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116398>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G., Ghio C., Persico M., Tomasi S./congresso_nome:Modelling chemical reactivity: from gas-phase to solution and enzymes. An international conference in honor of Professor Jean-Louis Rivail - 16-18 luglio/congresso_luogo:Nancy (France)/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

7)-A Combined ab initio and Free Energy Approach for Studying Enzyme Catalyzed Reaction Mechanisms

Alagona G.; Campanile S.; Ghio C.; Kollman P.A.

VI Convegno su: Complex systems: structure, properties, reactivity and dynamics - 10-13 giugno, Bologna, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116399>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G., Campanile S., Ghio C., Kollman P.A./congresso_nome:VI Convegno su: Complex systems: structure, properties, reactivity and dynamics - 10-13 giugno/congresso_luogo:Bologna/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

8)-A Combined Circular Dichroism-Molecular Mechanics Approach to Define the Molecular Conformation of Cholic Acid Derivatives

Alagona G.; Ghio C.; Iuliano A.; Monti S.

XIth International Congress of Quantum Chemistry, July 20-26, Bonn (Germany), 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116400>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G., Ghio C., Iuliano A., Monti S./congresso_nome:XIth International Congress of Quantum Chemistry, July 20-26/congresso_luogo:Bonn (Germany)/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

9)-Conformational Preferences of R-norepinephrine in the Gas Phase and in Aqueous Solution

Alagona G.; Ghio C.; Nagy P.I.

XIth International Congress of Quantum Chemistry, July 20-26, Bonn (Germany), 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116401>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G., Ghio C., Nagy P.I./congresso_nome:XIth International Congress of Quantum Chemistry, July 20-26/congresso_luogo:Bonn (Germany)/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

10)-QM/FE Comparison between the through-Enediolate and through-Enediol Pathways in TIM

Alagona G.; Campanile S.; Ghio C.

29ème Congrès International des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine (ChiTEL 2003), Sept. 7-12, Marrakech (Morocco), 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116402>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G., Campanile S., Ghio C./congresso_nome:29ème Congrès International des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine (ChiTEL 2003), Sept. 7-12/congresso_luogo:Marrakech (Morocco)/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

11)-B3LYP/6-31G* vs MMFF94 Conformational Landscapes of all the Possible Stereoisomers of a few Pterocarpans with Biological Activity

Alagona G.; Ghio C.; Monti S.

29ème Congrès International des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine (ChiTEL 2003), Sept. 7-12, Marrakech (Morocco), 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116403>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G., Ghio C., Monti S./congresso_nome:29ème Congrès International des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine (ChiTEL 2003), Sept. 7-12/congresso_luogo:Marrakech (Morocco)/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

12)-Analysis of the Interaction Energy for Various Oxazaborolidine-Ketone Adducts and Related Systems

Alagona G.; Ghio C.; Tomasi S.

29ème Congrès International des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine (ChiTEL 2003), Sept. 7-12, Marrakech (Morocco), 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116404>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G., Ghio C., Tomasi S./congresso_nome:29ème Congrès International des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine (ChiTEL 2003), Sept. 7-12/congresso_luogo:Marrakech (Morocco)/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

13)-B3LYP/6-31G* Conformational Preferences in Vacuo of Natural Isoflavonoid Pterocarpanes with Antitumoral Activity

Alagona G.; Ghio C.; Monti S.

V Congresso del Gruppo Interdivisionale di Chimica Computazionale (GICC 2003): dal Calcolo della Struttura Elettronica alla Bioinformatica, 18-19 dic., Certosa di Pontignano, Siena, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116405>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G., Ghio C., Monti S./congresso_nome:V Congresso del Gruppo Interdivisionale di Chimica Computazionale (GICC 2003): dal Calcolo della Struttura Elettronica alla Bioinformatica, 18-19 dic./congresso_luogo:Certosa di Pontignano, Siena/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

14)-Quantum Mechanical Study of Stereoselectivity in the Oxazaborolidine-catalysed Reduction of Acetophenone

Alagona G.; Ghio C.; Persico M.; Tomasi S.

Scuola Nazionale in: Simulazioni Computazionali Multiscala Applicate alle Scienze dei Materiali, Feb. 17-21, Modena (Italy), 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116406>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G., Ghio C., Persico M., Tomasi S./congresso_nome:Scuola Nazionale in: Simulazioni Computazionali Multiscala Applicate alle Scienze dei Materiali, Feb. 17-21/congresso_luogo:Modena (Italy)/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

15)-Transferable Group Contributions for a Variety of Chemical Phenomena and Compounds

Alagona G.; Campanile S.; Ghio C.; Giolitti A.; Monti S.

Scuola Nazionale in: Simulazioni Computazionali Multiscala Applicate alle Scienze dei Materiali, Feb. 17-21, Modena, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116407>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G., Campanile S., Ghio C., Giolitti A., Monti S./congresso_nome:Scuola Nazionale in: Simulazioni Computazionali Multiscala Applicate alle Scienze dei Materiali, Feb. 17-21/congresso_luogo:Modena/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

16)-THERMODYNAMICS OF MIXING, DIELECTRIC RELAXATION

E. Tombari; M.C. Righetti; M. Scalari; G. Conti

AIM - XVI Convegno Italiano di Scienza e Tecnologia delle Macromolecole, Pisa, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116424>

info:cnr-pdr/source/autori:E. Tombari, M.C. Righetti, M. Scalari, G. Conti/congresso_nome:AIM - XVI Convegno Italiano di Scienza e Tecnologia delle Macromolecole/congresso_luogo:Pisa/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

17)-Magnetic Resonance Force Microscopy at IPCF-CNR Pisa

L. Lenci; D. Friselli; M. Martinelli

EPR and NMR at high fields: applications to magnetic systems and superconductors, Satellite conference of the ICM 2003, Pisa, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116442>

info:cnr-pdr/source/autori:L. Lenci, D. Friselli, M. Martinelli/congresso_nome:EPR and NMR at high fields: applications to magnetic systems and superconductors, Satellite conference of the ICM 2003/congresso_luogo:Pisa/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

18)-Oxidation of lignin model compounds catalysed by a Schiff base cobalt complex: a multifrequency EPR investigation of the reaction mechanism

C. Canevali; M. Orlandi; F. Morazzoni; L. Pardi; B. Rindone; R. Scotti; J. Sipila

2nd Italian Meeting on Lignin Chemistry, Como, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116443>

info:cnr-pdr/source/autori:C. Canevali, M. Orlandi, F. Morazzoni, L. Pardi, B. Rindone, R. Scotti, J. Sipila/congresso_nome:2nd Italian Meeting on Lignin Chemistry/congresso_luogo:Como/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

19)-The SENTINEL european network

M. Martinelli; L. A. Pardi

EPR and NMR at High Field: Applications to Magnetic Systems and Superconductors. Satellite Conference of the ICM 2003, Pisa, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116445>

info:cnr-pdr/source/autori:M. Martinelli, L. A. Pardi/congresso_nome:EPR and NMR at High Field: Applications to Magnetic Systems and Superconductors. Satellite Conference of the ICM

2003/congresso_luogo:Pisa/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

20)-Birefringences: a challenge for both theory and experiment

Rizzo; A.subjectBirefringences

International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2003 (ICCMSE 2003), pp. 530–533, Kastoria, 12-16 Settembre, 2003

[urn:isbn:981-238-595-9](http://www.cnr.it/prodotto/i/116493)

info:cnr-pdr/source/autori:Rizzo, A./congresso_nome:International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2003 (ICCMSE 2003)/congresso_luogo:Kastoria/congresso_data:12-16 Settembre, 2003/anno:2003/pagina_da:530/pagina_a:533/intervallo_pagine:530–533

21)-Space and frequency domain reconstruction strategies in a confocal microscope based on patterned illumination and wide-field image collection

Heintzmann R. (1); Benedetti P. A. (2)subjectmicroscopia otticasubjectmicroscopia confocalesubjectfluorescenza subjectrisoluzione spaziale

Focus on Microscopy 2003, Genova, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116493>

info:cnr-pdr/source/autori:Heintzmann R. (1), Benedetti P. A. (2)/congresso_nome:Focus on Microscopy 2003/congresso_luogo:Genova/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

22)-Microwave Hall Effect in n-doped ZnSe

E.Prati; S.Faralli; M.Martinelli; G.E. Annino

European Microwave Week, Munich, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116494>

info:cnr-pdr/source/autori:E.Prati, S.Faralli, M.Martinelli, G.E. Annino/congresso_nome:European Microwave Week/congresso_luogo:Munich/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

23)-Microscopia Video-Confocale

Pier Alberto Benedettisubjectmicroscopia otticasubjectmicroscopia confocalesubjectfluorescenza subjectrisoluzione spazialesubjectstrumentazione

Microscopie innovative per le biotecnologie, Firenze, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/116788>

info:cnr-pdr/source/autori:Pier Alberto Benedetti/congresso_nome:Microscopie innovative per le biotecnologie/congresso_luogo:Firenze/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

24)-YET ANOTHER EXOTIC PROPERTY: JONES BIREFRINGENCE

Rizzo; A.

Trygve Helgaker's 50th birthday meeting, Tromsøe, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/117100>

info:cnr-pdr/source/autori:Rizzo, A./congresso_nome:Trygve Helgaker's 50th birthday meeting/congresso_luogo:Tromsøe/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

25)-MOLECULAR PROPERTIES: A CHALLENGE FOR DFT

Rizzo; A.

Workshop on Density Functional Theory, Present and Future Challenges, Stockholm, Sweden, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/117102>

info:cnr-pdr/source/autori:Rizzo, A./congresso_nome:Workshop on Density Functional Theory, Present and Future Challenges/congresso_luogo:Stockholm, Sweden/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

26)-Ab Initio Theoretical Methods for Studying Intermolecular Forces

Alagona G.; Ghio C.

, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/137198>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G. , Ghio C./titolo:Ab Initio Theoretical Methods for Studying Intermolecular Forces/titolo_volume:/curatori_volume:/editore:/anno:2003

27)-Ab Initio Evaluation of the Strength of Hydrogen Bonding and Stacking Interactions

Alagona G.; Ghio C.

, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/137199>

info:cnr-pdr/source/autori:Alagona G., Ghio C./titolo:Ab Initio Evaluation of the Strength of Hydrogen Bonding and Stacking Interactions/titolo_volume:/curatori_volume:/editore:/anno:2003

28)-Method for the acquisition of images by confocal microscopy

Benedetti P. A.;

97830468.1

<http://www.cnr.it/prodotto/i/144976>

29)-Advances in Space Environment Research

Chian A.C.L.; Cairns I.H.; Gabriel S.B.; Goedbloed J.P.; Hada T.; Leubner M.; Nocera L.; Stening R.; Toffoletto F.; Uberoi C.; Valdivia J.A.; Villante U.; Wu C.-C.; Yan Y.subjectSpace
PhysicssubjectSpace WeathersubjectHigh Performance Computing
2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/146434>

info:cnr-pdr/source/autori:Chian A.C.L., Cairns I.H., Gabriel S.B., Goedbloed J.P., Hada T.,
Leubner M., Nocera L., Stening R., Toffoletto F., Uberoi C., Valdivia J.A., Villante U., Wu C.-
C., Yan Y./titolo:Advances in Space Environment Research/editore:/anno:2003

30)-Ruotatore per mono- cristalli.

C. A. Massa; M. Martinelli; L. Pardi; V. Bercu

2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/149175>

31)-Termostato per misure EPR

C. A. Massa; V. Bercu; M. Martinelli; L. Pardi

2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/149176>

32)-Microscopio ottico video-confocale VCM

P. A. Benedetti; D. Guidarini

2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/149177>

33)-Valutazione del ruolo del legame a idrogeno nella biodisponibilità di farmaci

Campanile Silvio; Alagona Giuliano; Ghio Caterina

2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/158293>

34)-Extrinsic effects in High Field EPR

G. Annino; V.I. Bercu; M. Cassettari; D. Friselli; M. Martinelli; C.A. Massa; L.A. Pardi; I. Ricci;
E. Strambini

*EPR and NMR at High Field: Applications to Magnetic Systems and Superconductors. Satellite
Conference of the ICM 2003, Pisa, 2003*

<http://www.cnr.it/prodotto/i/172249>

info:cnr-pdr/source/autori:G. Annino, V.I. Bercu, M. Cassettari, D. Friselli, M. Martinelli, C.A. Massa, L.A. Pardi, I. Ricci, E. Strambini,/congresso_nome:EPR and NMR at High Field: Applications to Magnetic Systems and Superconductors. Satellite Conference of the ICM 2003/congresso_luogo:Pisa/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

35)-Cristallizzazione e morfologia del poli(butilene tereftalato)

Di Lorenzo M.L.; Righetti M.C.

AIM - XVI Convegno Italiano di Scienza e Tecnologia delle Macromolecole, Pisa, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/172841>

info:cnr-pdr/source/autori:Di Lorenzo M.L., Righetti M.C./congresso_nome:AIM - XVI Convegno Italiano di Scienza e Tecnologia delle Macromolecole/congresso_luogo:Pisa/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

36)-Nuova calorimetria impulsiva con sensore dilatometrico di temperatura

G.C. Bussolino; G. Salvetti

2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/173473>

37)-Tip-sample energy transfer in apertureless near-field fluorescence microscopy

Gucciardi P.G.; Cefalì E.; Patanè S.; Labardi M.; Allegrini M.

Euroconference on Nano-Optics: Surface plasmon Photonics, Granada (Spain), 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/173740>

info:cnr-pdr/source/autori:Gucciardi P.G., Cefalì E., Patanè S., Labardi M., Allegrini M./congresso_nome:Euroconference on Nano-Optics: Surface plasmon Photonics/congresso_luogo:Granada (Spain)/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine:

38)-La calorimetria modulata nello studio della fusione dei polimeri: poli(butilene tereftalato)

Di Lorenzo M.L.; Righetti M.C.

XVI Convegno italiano di scienza e tecnologia delle macromolecole, Pisa, 2003

<http://www.cnr.it/prodotto/i/174022>

info:cnr-pdr/source/autori:Di Lorenzo M.L., Righetti M.C./congresso_nome:XVI Convegno italiano di scienza e tecnologia delle macromolecole/congresso_luogo:Pisa/congresso_data:2003/anno:2003/pagina_da:/pagina_a:/intervallo_pagine: