

ALLEGATO B

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n. 1 posto di Ricercatore a tempo determinato in tenure track (RTT), riservata ai sensi dell'art.14 comma 6-septiesdecies del decreto legge 30 aprile 2022, n. 36 convertito con modificazioni, dalla Legge 29 giugno 2022, n. 79

per il settore concorsuale: 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche

settore scientifico-disciplinare: gruppo scientifico-disciplinare 03/CHEM-02 - Chimica fisica; settore scientifico-disciplinare CHEM-02/A - Chimica fisica

presso il Dipartimento di Chimica

(avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 49 del 18/06/2024) Codice concorso **5573**

Andrea Martini **CURRICULUM VITAE**

INFORMAZIONI PERSONALI

| | |
|----------------------------------|---|
| Cognome | Martini |
| Nome | Andrea |
| Researcher unique identifier(s): | - ResearcherID: JRW-8465-2023 - ORCID: https://orcid.org/0000-0001-8820-2157 - Scopus: https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57195921730 - Google Scholar: https://scholar.google.com/citations?user=j953RiEAAAAJ&hl=it |
| Data di nascita | ██████████ |
| Nazionalità | Italiana |
| Indirizzo | Interface Science Department (ISC), Fritz Haber Institute, Faradayweg 4-6, 14195 - Berlino (Germania) |

TITOLI

TITOLO DI STUDIO

Laurea Magistrale in Fisica, indirizzo Tecnologie Avanzate.

Università degli Studi di Torino, Dipartimento di Fisica.

- o Votazione: 110 cum Laude e Menzione Onorevole.
- o Data conseguimento: 15/12/2016.
- o Titolo della Tesi: "*Active sites in zeolite-based catalysts probed by X-ray synchrotron techniques*".
- o Supervisore: Prof. Carlo Lamberti.

TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA O EQUIVALENTI, OVVERO, PER I SETTORI INTERESSATI, DEL DIPLOMA DI SPECIALIZZAZIONE MEDICA O EQUIVALENTE, CONSEGUITO IN ITALIA O ALL'ESTERO

Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche e dei Materiali.

Università degli Studi di Torino, Dipartimento di Chimica.

- o Votazione: cum Laude.
- o Data conseguimento: 16/12/2020.
- o Titolo della Tesi: "*Understanding the nature and the evolution of chemical species by advanced data analysis techniques of operando and in situ X-ray spectroscopy experiments*".
- o Supervisor: Prof. Silvia Bordiga (precedentemente Prof. Carlo Lamberti) e Prof. Alexander V. Soldatov.

CONTRATTI DI RICERCA, ASSEGNI DI RICERCA O EQUIVALENTI

- o 01/11/2022 ad oggi: Postdoc presso il gruppo di ricerca "Operando Hard X-rays Spectroscopy". Interface Science Department (ISC), Fritz Haber Institute of the Max Planck Society (Germania).
 - Organo finanziatore: Max Planck Foundation (Research associate).
 - Supervisor: Prof. Beatriz Roldan Cuenya e Dr. Janis Timoshenko.
- o 01/11/2021 - 31/10/2022: Postdoc presso il gruppo di ricerca "Operando Hard X-rays Spectroscopy". Interface Science Department (ISC), Fritz Haber Institute of the Max Planck Society (Germania).
 - Organo finanziatore: Max Planck Foundation (Fellowship).

- Titolo del progetto: *"Synchrotron-based operando studies of catalysts' bulk and surface structure evolution under electrochemically and thermally driven reaction conditions. Development of advances, machine learning based approaches for spectroscopic data interpretation in heterogeneous catalysts"*.
 - Supervisor: Prof. Beatriz Roldan Cuenya e Dr. Janis Timoshenko.
- o 01/12/2020 - 31/10/2021: Postdoc (Assegno di Ricerca) presso il gruppo "Surfin" (Chimica Fisica delle Superfici e delle Interfacce) Università degli Studi di Torino, Dipartimento di Chimica.
 - Organo finanziatore: PRIN2017-Linea A.
 - Titolo del progetto: *"Development of methods for the collection and analysis of data deriving from X-ray Absorption measurements for the MOSCATO project"*.
 - Supervisore: Prof. Elisa Borfecchia.
- o 01/03/2017 - 30/09/2017: Borsista di ricerca presso il gruppo "Surfin" (Chimica Fisica delle Superfici e delle Interfacce). Università degli Studi di Torino, Dipartimento di Chimica.
 - Organo finanziatore: Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienza e Tecnologia dei Materiali.
 - Titolo del progetto: *"Determinazione della natura e dell'evoluzione di specie chimiche tramite analisi chemiometrica di dati spettroscopici raccolti in condizioni in situ ed operando"*.
 - Supervisore: Prof. Carlo Lamberti.

ATTIVITÀ DIDATTICA A LIVELLO UNIVERSITARIO IN ITALIA O ALL'ESTERO

- o 1/10/2018 - 20/11/2018: **Assistente di Laboratorio** del corso "Laboratorio di Fisica della Materia" per il corso di Laurea Magistrale in Fisica. Università degli Studi di Torino, Dipartimento di Fisica.
- Responsabile del Corso: Prof. Ettore Vittone.
- CFU: 1.

ATTIVITÀ COME SUPERVISORE DI TESI DI LAUREA/PROGETTI DI RICERCA

- o Co-Supervisione di tre Tesi di Laurea Magistrale in Scienze dei Materiali: Raj Krishna Shrestha, Luca Bugarin (ora dottorando presso la sorgente di luce di sincrotrone ESRF), Mario Leopoldo Rivera Salazar (ora dottorando presso la sorgente di luce di sincrotrone ELETTRA).
- o Co-Supervisore del lavoro scientifico del borsista di ricerca David Simonne (ora PostDoc presso la sorgente di luce di sincrotrone SOLEIL) nell'ambito del progetto MOSCATO (PRIN2017-Linea A).

DOCUMENTATA ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA PRESSO QUALIFICATI ISTITUTI ITALIANI O STRANIERI

- Partecipazione come PostDoc (Research Fellow) alle attività di ricerca svolte nel periodo compreso tra il 01/10/2017 ed il 1/11/2021 presso lo Smart Materials Research Institute (Southern Federal University, Rostov On Don, Russia) in collaborazione con Prof. A. V. Soldatov, Prof. S. A. Guda e Dr. A. A. Guda, relative all' applicazione del Machine Learning per il trattamento di dati provenienti da sorgenti di luce di sincrotrone (in prevalenza spettroscopia di assorbimento di raggi X).

REALIZZAZIONE DI ATTIVITÀ PROGETTUALE

- o Responsabilità scientifica come proponente principale o co-proponente per 29 progetti di ricerca da svolgersi presso facility su larga scala (sorgenti di luce di sincrotrone): Incarichi di ricerca presso: i) l'European Synchrotron Radiation Facility (Grenoble, Francia: 12 progetti "standard"). ii) Elettra (Trieste, Italia: 1 progetto "long term" e 4 progetti "standard"). iii) Max IV (Lund, Svezia: 2 progetti "standard"). iv) Bessy II (Berlino, Germania: 5 progetti "standard"). v) Alba (Barcellona, Spagna: 3 progetti "standard"). vi) Petra III (Amburgo, Germania: 1 progetto "standard") per un totale di più di 3300 ore di tempo macchina (circa 130 giorni) tra il 2017 ed il 2024. Tutti i citati esperimenti sono stati approvati dopo una valutazione da parte di un review panel internazionale composto da esperti del settore. (il costo di ogni ora di misura per utenti esterni è di circa 500 €).

ORGANIZZAZIONE, DIREZIONE E COORDINAMENTO DI CENTRI O GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI O PARTECIPAZIONE AGLI STESSI

- o 01/01/2020 - 31/10/2021: Progetto CUBE *"Copper Based catalysts for selective C-H activation"*, ERC Synergy.
- Ruolo: Partecipante; PI (UniTO unit): Prof. S. Bordiga (budget unità UniTO: 2 100 000 €).

- o 05/06/2019 - 31/10/2021 Project MOSCATo “Cutting-edge X-ray methods and models for the understanding of surface site reactivity in heterogeneous catalysts and sensors”, PRIN-2017.
- Ruolo: Partecipante; PI (UniTO coordinatore): Prof. G. Ricchiardi (budget unità UniTO: 209 406 €).

SEMINARI TENUTI SU INVITO

- o 24/04/2024. Titolo: “Dynamic structure of single atom electrocatalysts“. Joint ISC-AC Max Planck Workshop. Eisenach (Germania).
- o 21/09/2023. Titolo: “Tracking the evolution of Ni-based single atom catalysts for the CO₂ electroreduction reaction: an operando XAS and XES study“. NIS colloquium: (Photo)catalysts for sustainable fuel production, Università degli Studi di Torino.
- o 17/02/2020. Titolo: “Retrieving quantitative structural information from X-ray absorption data using Machine Learning algorithms“. NIS colloquium: Machine Learning Meets Chemistry, Università degli Studi di Torino.
- o 20/07/2018. Titolo: “XAS Multivariate Curve Resolution (MCR) analysis applied to the Cu-CHA zeolite“. NIS Colloquium: Cu-based zeolites, versatile materials for redox catalysis. Università degli Studi di Torino.

ORGANIZZAZIONI DI CONGRESSI/SESSIONI

- o 5-7/09/2024. Chair per la sessione MS6 “Advanced modelling of experimental data“. Italian Synchrotron Society (SILS2022) annual meeting. Rende (Italia).

ATTIVITÀ DI RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI E INTERNAZIONALI

- o 04/04/2024. Titolo (Elected Talk): “Tracking the evolution of Ni-based single atom catalysts for the CO₂ electroreduction reaction: an operando XAS/XES study assisted by machine learning techniques“. EcatalytiX Conference. Strasburgo (Francia).
- o 29/08/2023. Titolo: “Tracking the evolution of Ni-based single atom catalysts for the CO₂ electroreduction reaction: an operando XAS study assisted by machine learning techniques“. 15th European Congress in Catalysis (Europacat2023). Prague (Repubblica Ceca).
- o 13/09/2022. Titolo: “Tracking the evolution of Ni-based single atom catalysts for the CO₂ electroreduction reaction: an operando XAS study assisted by machine learning techniques“. Italian Synchrotron Society (SILS2022) annual meeting. Trieste.
- o 13/07/2021. Titolo: “Principal Component Analysis as the key for the XANES Spectral Decomposition problem“. 18th International Conference of X-Ray Absorption Fine Structure (XAFS 2021). Sidney (Australia)
- o 12/07/2021. Titolo: “Revisiting the FEFF-based EXAFS fit through a Supervised Machine Learning Approach“. 18th International Conference of X-Ray Absorption Fine Structure (XAFS 2021). Sidney (Australia).
- o 22/06/2021. Titolo: “An alternative EXAFS fitting procedure based on a Supervised Machine Learning approach“. Italian Synchrotron Society (SILS2021) annual meeting. Bologna.
- o 09/09/2019. Titolo: “Retrieving quantitative structural information from XANES spectra by means of Multivariate and Machine Learning approaches“. Italian Synchrotron Society (SILS2019) annual meeting. Camerino
- o 01/04/2019. Titolo: “Multivariate techniques for spectroscopic data analysis“. Week of Science, Southern Federal University. Rostov-on-Don (Russia)
- o 30/10/2018. Titolo: “Preliminary results by multivariate and wavelet transform analysis“. 7th International School for young researchers - Smart Nanomaterials workshop (IWSN2018): Design of poly-functional structures: theory and synthesis. Southern Federal University. Rostov-on-Don (Russia).

AUTORE PRINCIPALE DI POSTER PRESENTATI IN CONFERENZE NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

- o 30/05/2024. Titolo: *"Tracking the evolution of Ni-based single atom catalysts for the CO₂ electroreduction reaction: an operando X-ray Absorption and Emission study assisted by machine learning techniques"*. FROM HOMOGENEOUS CATALYSIS TO SURFACE ORGANOMETALLIC CHEMISTRY AND SINGLE ATOM CATALYSTS (Convegno in memoria del Prof. Renato Ugo). Accademia dei Lincei. Roma.
- o 28/09/2022. Titolo: *"Tracking the evolution of Ni-based single atom catalysts for the CO₂ electroreduction reaction: an operando XAS study"*. Electrochemistry 2022. Berlino (Germania).
- o 13/07/2021. Titolo: *"THORONDOR: a software for fast treatment and analysis of low energy XAS data"*. 18th International Conference of X-Ray Absorption Fine Structure (XAFS 2021). Sidney (Australia).
- o 04/02/2020. Titolo: *"Wavelet Analysis of in situ and operando EXAFS data: a qualitative and quantitative approach"*. ESRF User-Meeting 2020. Grenoble (Francia).
- o 26/07/2018. Titolo: *"Multivariate Analysis of in situ XAS to determine Cu-speciation in zeolite catalysts"*. 17th International Conference of X-Ray Absorption Fine Structure (XAFS 2018). Cracovia (Polonia).
- o 26/07/2018. Titolo: *"Cu-oxo species in Zeolites: Preliminary Results by Wavelets Analysis"*. 17th International Conference of X-Ray Absorption Fine Structure (XAFS 2018). Cracovia (Polonia).

COMMISSION OF TRUST

- o 2020 - ad oggi. Regolare reviewer per i seguenti giornali indicizzati ISI: The Journal of Physical Chemistry Letters, The Journal of Physical Chemistry A/B/C, ACS Catalysis, RSC Molecular Catalysis A, Journal of Synchrotron Radiation.

CONSEGUIMENTO DI PREMI E RICONOSCIMENTI NAZIONALI E INTERNAZIONALI PER ATTIVITÀ DI RICERCA

- o Vincitore del premio "Best PhD Thesis", conferito dalla Società Italiana Luce di Sincrotrone (SILS-2021, congresso tenutosi a Bologna) per la migliore tesi di dottorato realizzata tra l'anno 2019 e 2021.
- o Vincitore del premio per la migliore presentazione relativa al contributo presentato alla conferenza "Week of Science: The Smart Materials and Megaclass research facilities". Titolo: *"Multivariate techniques for spectroscopic data analysis"* (Congresso tenutosi presso la Southern Federal University, Rosov on Don (Russia)).

ABILITAZIONE SCIENTIFICA NAZIONALE (ASN) COME PROFESSORE DI SECONDA FASCIA PER I SEGUENTI SETTORI SCIENTIFICI

- o Dal 01/02/2023 al 01/02/2033 in:
 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche (Settore Scientifico 03/A2).
- o Dal 06/02/2023 al 06/02/2033 in:
 - Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici (Settore Scientifico 03/B1).
 - Fisica Sperimentale della Materia (Settore Scientifico 02/B1).
- o Dal 01/12/2023 al 01/12/2034 in:
 - Fisica Teorica della Materia (Settore Scientifico 02/B2).

PRODUZIONE SCIENTIFICA

INDICI BIBLIOMETRICI (aggiornati al 18/07/2024):

Scopus (Google Scholar)

o Sum of Times cited 1573 (1912)

o H index 20 (20)

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE. Il simbolo “*” indica che il Dr. Andrea Martini è autore corrispondente della pubblicazione mentre il simbolo “#” indica che condivide il ruolo di primo autore nell’articolo.

1. Martini A.*, Timoshenko J., Rüscher M., Hursán D., Monteiro M. C. O., Liberra E., Cuenya, B. R. (2024). Revealing the structure of the active sites for the electrocatalytic CO₂ reduction to CO over Co single atom catalysts using operando XANES and machine learning. JOURNAL OF SYNCHROTRON RADIATION, vol. 31, p. 1-10. DOI: 10.1107/S1600577524004739.
2. Haase F. T., Ortega E., Saddeler S., Schmidt F. P., Cruz D., Scholten F., Rüscher M., Martini A., Jeon H. S., Herzog A. et al. (2024). The Role of Fe decoration on the oxygen evolving state of Co₃O₄ nanocatalysts. ENERGY & ENVIRONMENTAL SCIENCE, vol. 17, p. 2046-2058. DOI: 10.1039/d3ee02809g.
3. Hursán D., Timoshenko J., Ortega E., Jeon H. S., Rüscher M., Herzog A., Rettenmaier C., Chee S. W., Martini A., Koshy D., Cuenya, B. R. (2023). Reversible Structural Evolution of Metal-Nitrogen-Doped Carbon Catalysts During CO₂ Electroreduction: An Operando X-ray Absorption Spectroscopy Study. ADVANCED MATERIALS, ISSN: 0935-9648, doi: 10.1002/adma.202307809
4. Martini A.; Hursán D.; Timoshenko J.; Rüscher M.; Haase F.; Rettenmaier C.; Ortega E.; Etxebarria A.; Cuenya B. R. (2023). Tracking the Evolution of Single-Atom Catalysts for the CO₂ Electrocatalytic Reduction Using Operando X-ray Absorption Spectroscopy and Machine Learning. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, vol. 145, p. 17351-17366, ISSN: 0002-7863, doi: 10.1021/jacs.3c04826
5. Murphy E.; Liu Y. C.; Matanovic I.; Rüscher M.; Huang Y.; Ly A.; Guo S. Y.; Zang W. J., Yan X. X.; Martini A.; Timoshenko J., Cuenya B.R., Zenyuk I.V., Pan X.Q, Spoerke E.D., Atanasov P. (2023). Elucidating electrochemical nitrate and nitrite reduction over atomically-dispersed transition metal sites. NATURE COMMUNICATIONS, vol. 14, p. 1-15, doi: 10.1038/s41467-023-40174-4
6. Zarupski J., Piovano A., Werny M. J., Martini A., Braglia L., Torelli P., Hendriksen C., Friederichs, N. H.; Meirer F., Weckhuysen, B. M., Groppo, E. (2023) Silica-magnesium-titanium Ziegler-Natta catalysts. Part II. Properties of the active sites and fragmentation behaviour. JOURNAL OF CATALYSIS, vol. 423, p. 10-18, ISSN 0021-9517, doi: 10.1016/j.jcat.2023.04.015
7. Martini A., Negri C., Bugarin L., Deplano G., Abasabadi R. K., Lomachenko K. A., Janssens T. V. W., Bordiga S., Berlier G., Borfecchia E. (2022). Assessing the Influence of Zeolite Composition on Oxygen-Bridged Diamino Dicopper(II) Complexes in Cu-CHA DeNO_x Catalysts by Machine Learning-Assisted X-ray Absorption Spectroscopy. THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS, vol. 13, p. 6164-6170, ISSN: 1948-7185, doi: 10.1021/acs.jpcclett.2c01107

8. Molokova A. Yu., Borfecchia E., Martini A., Pankin I. A., Atzori C., Mathon O., Bordiga S., Wen F., Vennestrøm P. N. R., Berlier G., Janssens T. V. W., Lomachenko K. A. (2022). SO₂ Poisoning of Cu-CHA deNO_x Catalyst: The Most Vulnerable Cu Species Identified by X-ray Absorption Spectroscopy. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY AU, vol. 2, p. 787-792, ISSN: 2691-3704, doi: 10.1021/jacsau.2c00053
9. Tavani F., Capocasa G., Martini A., Sessa F., Di Stefano S., Lanzalunga O., D'Angelo P. (2021). Direct structural and mechanistic insights into fast bimolecular chemical reactions in solution through a coupled XAS/UV-Vis multivariate statistical analysis. DALTON TRANSACTIONS, vol. 50, p. 131- 142, ISSN: 1477-9226, doi: 10.1039/d0dt03083j
10. Martini A.*, Guda A. A., Guda S. A., Bugaev A. L., Safonova O. V., Soldatov A. V. (2021). Machine learning powered by principal component descriptors as the key for sorted structural fit of XANES. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, vol. 23, p. 17873-17887, ISSN: 1463-9076, doi: 10.1039/D1CP01794B
11. Pashkov D. M., Guda A. A., kirichkov M. V., Guda S. A., Martini A., Soldatov S. A., Soldatov A. V. (2021). Quantitative Analysis of the UV-Vis Spectra for Gold Nanoparticles Powered by Supervised Machine Learning. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. C, vol. 125, p. 8656-8666, ISSN: 1932-7447, doi: 10.1021/acs.jpcc.0c10680
12. Guda S. A., Algasov A. S., Guda A. A., Martini A., Kravtsova A. N., Bugaev A. L., Guda L. V., Soldatov A. V. (2021). Search for Analytical Relations between X-Ray Absorption Spectra Descriptors and the Local Atomic Structure Using Machine Learning. SURFACE INVESTIGATION: X-RAY, SYNCHROTRON AND NEUTRON TECHNIQUES, vol. 15, p. 934-938, ISSN: 1027-4510, doi: 10.1134/S1027451021050050
13. Guda A. A., Guda S. A., Martini A.*, Kravtsova A. N., Algasov A., Bugaev A., Kubrin S. P., Guda L. V., Šot P., van Bokhoven J. A., Copéret C., Soldatov A. V. (2021). Understanding X-ray absorption spectra by means of descriptors and machine learning algorithms. NPJ COMPUTATIONAL MATERIALS, vol. 7, p. 1-13, ISSN: 2057-3960, doi: 10.1038/s41524-021-00664-9
14. Pankin I. A., Issa Hamoud H., Lomachenko K. A., Rasmussen S. B., Martini A., Bazin P., Valtchev V., Daturi M., Lamberti C., Bordiga S. (2021). Cu- And Fe- speciation in a composite zeolite catalyst for selective catalytic reduction of NO_x: insights from operando XAS. CATALYSIS SCIENCE & TECHNOLOGY, vol. 11, p. 846-860, ISSN: 2044-4753, doi: 10.1039/d0cy01654c
15. Piovano A., Signorile M., Braglia L., Torelli P., Martini A., Wada T., Takasao G., Taniike T., Groppo E. (2021). Electronic Properties of Ti Sites in Ziegler-Natta Catalysts. ACS CATALYSIS, vol. 11, p. 9949-9961, ISSN: 2155-5435, doi: 10.1021/acscatal.1c01735

16. Deplano G., Martini A.[#], Signorile M., Borfecchia E., Crocella V., Svelle S., Bordiga S. (2021). Copper Pairing in the Mordenite Framework as a Function of the CuI/CuII Speciation. *ANGEWANDTE CHEMIE. INTERNATIONAL EDITION*, vol. 60, p. 25891-25896, ISSN: 1433-7851, doi: 10.1002/anie.202109705
17. Martini A.^{*}, Bugaev A. L., Guda S. A., Guda A. A., Priola E., Borfecchia E., Smolders S., Janssens K., De Vos D., Soldatov A. V. (2021). Revisiting the Extended X-ray Absorption Fine Structure Fitting Procedure through a Machine Learning-Based Approach. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY*, vol. 125, p. 7080-7091, ISSN: 1089-5639, doi: 10.1021/acs.jpca.1c03746
18. Negri C., Borfecchia E., Martini A., Deplano G., Lomachenko K. A., Janssens T. V. W., Berlier G., Bordiga S. (2021). In situ X-ray absorption study of Cu species in Cu-CHA catalysts for NH₃-SCR during temperature-programmed reduction in NO/NH₃. *RESEARCH ON CHEMICAL INTERMEDIATES*, vol. 47, p. 357-375, ISSN: 0922-6168, doi: 10.1007/s11164-020-04350-1
19. Negri C., Martini A., Deplano G., Lomachenko K. A., Janssens T. V. W., Borfecchia E., Berlier G., Bordiga S. (2021). Investigating the role of Cu-oxo species in Cu-nitrate formation over Cu-CHA catalysts. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, vol. 23, p. 18322-18337, ISSN: 1463- 9076, doi: 10.1039/d1cp01754c
20. Martini A.^{*}, Guda A. A., S. A. Guda, Dulina A., Tavani F., D'Angelo P., Borfecchia E., Soldatov A. V. (2021). Estimating a Set of Pure XANES Spectra from Multicomponent Chemical Mixtures Using a Transformation Matrix Approach, *Synchrotron Radiation Science and Applications. SPRINGER PROCEEDINGS IN PHYSICS*, vol. 220, p. 65-84, Basilea: Springer, Cham, ISBN: 978-3-030-72004-9, ISSN: 0930-8989, doi: 10.1007/978-3-030-72005-6_6
21. Tavani F., Martini A., Sessa F., Capocasa G., Olivo G., Lanzalunga O., Di Stefano S., D'Angelo P. (2021). Insights into the Structure of Reaction Intermediates Through Coupled X-ray Absorption/UV-Vis Spectroscopy. Springer International Publishing, *Synchrotron Radiation Science and Applications. SPRINGER PROCEEDINGS IN PHYSICS*, vol. 220, p. 141-154, Basilea: Springer, Cham, ISSN: 0930-8989, doi: 10.1007/978-3-030-72005-6_11
22. Tavani F., Martini A., Capocasa G., Di Stefano S., Lanzalunga O., D'Angelo P. (2020). Direct Mechanistic Evidence for a Nonheme Complex Reaction through a Multivariate XAS Analysis. *INORGANIC CHEMISTRY*, vol. 59, p. 9979- 9989, ISSN: 0020-1669, doi: 10.1021/acs.inorgchem.0c01132
23. Negri C., Selleri T., Borfecchia E., Martini A., Lomachenko K. A., Janssens T. V. W., Cutini M., Bordiga S., Berlier G. (2020). Structure and Reactivity of Oxygen-Bridged Diamino Dicopper(II) Complexes in Cu-Ion-Exchanged Chabazite Catalyst for NH₃-Mediated Selective Catalytic Reduction. *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*, vol. 142, p. 15884-15896, ISSN: 0002-7863, doi: 10.1021/jacs.0c06270

24. Guda A. A., Guda S. A., Martini A., Bugaev A. L., Soldatov M. A., Soldatov A. V., Lamberti C. (2020). Machine learning approaches to XANES spectra for quantitative 3D structural determination: The case of CO₂ adsorption on CPO- 27-Ni-MOF. *RADIATION PHYSICS AND CHEMISTRY*, vol. 175, 108430, ISSN: 0969-806X, doi: 10.1016/j.radphyschem.2019.108430
25. Tavani F., Capocasa G., Martini A., Sessa F., Di Stefano S., Lanzalunga O., D'Angelo P. (2020). Activation of C-H bonds by a nonheme iron(IV)-oxo complex: mechanistic evidence through a coupled EDXAS/UV-Vis multivariate analysis. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, vol. 23, p. 1188- 1196, ISSN: 1463-9076, doi: 10.1039/d0cp04304d
26. Pankin I. A., Borfecchia E., Martini A., Lomachenko K. A., Lamberti C., Soldatov A. V. (2020). DFT-assisted XANES simulations to discriminate different monomeric Cu(I) species in CHA catalysts. *RADIATION PHYSICS AND CHEMISTRY*, vol. 175, p. 108510, ISSN: 0969-806X, doi: 10.1016/j.radphyschem.2019.108510
27. Martini A.*, Pankin I. A., Marsicano A., Lomachenko K. A., Borfecchia E. (2020). Wavelet analysis of a Cu-oxo zeolite EXAFS simulated spectrum. *RADIATION PHYSICS AND CHEMISTRY*, vol. 175, p. 108333, ISSN: 0969- 806X, doi: 10.1016/j.radphyschem.2019.05.023
28. Martini A.*, Borfecchia E. (2020). Spectral decomposition of x-ray absorption spectroscopy datasets: Methods and applications. *CRYSTALS*, vol. 10, p. 1-46, ISSN: 2073-4352, doi: 10.3390/cryst10080664
29. Buono C., Martini A., Pankin I. A., Pappas D. K., Negri C., Kvande K., Lomachenko K. A., Borfecchia E. (2020). Local structure of Cu(I) ions in the MOR zeolite: A DFT-assisted XAS study. *RADIATION PHYSICS AND CHEMISTRY*, vol. 175, p. 108111, ISSN: 0969-806X, doi: 10.1016/j.radphyschem.2018.12.031
30. Pankin I. A., Martini A., Lomachenko K. A., Soldatov A. V., Bordiga S., Borfecchia E. (2020). Identifying Cu-oxo species in Cu-zeolites by XAS: A theoretical survey by DFT-assisted XANES simulation and EXAFS wavelet transform. *CATALYSIS TODAY*, vol. 345, p. 125-135, ISSN: 0920-5861, doi: 10.1016/j.cattod.2019.09.032
31. Simonne, D. H., Martini A.*, Signorile M., Piovano A., Braglia L., Torelli P., Borfecchia E., Ricchiardi G. (2020). THORONDOR: a software for fast treatment and analysis of low-energy XAS data. *JOURNAL OF SYNCHROTRON RADIATION*, vol. 27, p. 1741-1752, ISSN: 1600-5775, doi: 10.1107/S1600577520011388
32. Martini A., Signorile M., Negri C., Kvande K., Lomachenko K. A., Svelle S., Beato P., Berlier G., Borfecchia E., Bordiga S. (2020). EXAFS wavelet transform analysis of Cu-MOR zeolites for the direct methane to methanol conversion. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, vol. 22, p. 18950-18963, ISSN: 1463-9076, doi: 10.1039/d0cp01257b

33. Martini A.*, Guda S. A., Guda A. A., Smolentsev G., Algasov A., Usoltsev O., Soldatov M. A., Bugaev A., Rusalev Yu, Lamberti C., Soldatov A. V. (2020). PyFitit: The software for quantitative analysis of XANES spectra using machine-learning algorithms. *COMPUTER PHYSICS COMMUNICATIONS*, vol. 250, 107064, ISSN: 0010-4655, doi: 10.1016/j.cpc.2019.107064
34. Guda A. A., Guda S. A., Lomachenko K. A., Soldatov M. A., Pankin I. A., Soldatov A. V., Braglia L., Bugaev A. L., Martini A., Signorile M., Groppo E., Piovano A., Borfecchia E., Lamberti C. (2019). Quantitative structural determination of active sites from in situ and operando XANES spectra: From standard ab initio simulations to chemometric and machine learning approaches. *CATALYSIS TODAY*, vol. 336, p. 3-21, ISSN: 0920-5861, doi: 10.1016/j.cattod.2018.10.071
35. Priola E., Volpi G., Rabezzana R., Borfecchia E., Garino C., Benzi P., Martini A., Operti L., Diana E. (2019). Bridging Solution and Solid-State Chemistry of Dicyanoaurate: The Case Study of Zn-Au Nucleation Units. *INORGANIC CHEMISTRY*, vol. 59, p. 203-213, ISSN: 0020-1669, doi: 10.1021/acs.inorgchem.9b00961
36. Pappas D. K., Borfecchia E., Lomachenko K. A., Lazzarini A., Gutterod E. S., Dyballa M., Martini A., Berlier G., Bordiga S., Lamberti C., Arstad B., Olsbye U., Beato P., Svelle S. (2019). Cu-Exchanged Ferrierite Zeolite for the Direct CH₄ to CH₃ OH Conversion: Insights on Cu Speciation from X-Ray Absorption Spectroscopy. *TOPICS IN CATALYSIS*, vol. 62, p. 712-723, ISSN: 1022-5528, doi: 10.1007/s11244-019-01160-7
37. Lomachenko K. A., Martini A., Pappas D. K., Negri C., Dyballa M., Berlier G., Bordiga S., Lamberti C., Olsbye U., Svelle S., Beato P., Borfecchia E. (2019). The impact of reaction conditions and material composition on the stepwise methane to methanol conversion over Cu-MOR: An operando XAS study. *CATALYSIS TODAY*, vol. 336, p. 99-108, ISSN: 0920-5861, doi: 10.1016/j.cattod.2019.01.040
38. Zhang X., Ponte F., Borfecchia E., Martini A., Sanchez-Cano C., Sicilia E., Sadler P. J. (2019). Glutathione activation of an organometallic half-sandwich anticancer drug candidate by ligand attack. *CHEMICAL COMMUNICATIONS*, vol. 55, p. 14602-14605, ISSN: 1359-7345, doi: 10.1039/c9cc06725f
39. Pappas D. K., Borfecchia E., Dyballa M., Lomachenko K. A., Martini A., Berlier G., Arstad B., Lamberti C., Bordiga S., Olsbye U., Svelle S., Beato P. (2019). Understanding and Optimizing the Performance of Cu-FER for The Direct CH₄ to CH₃OH Conversion. *CHEMCATCHEM*, vol. 11, p. 621-627, ISSN: 1867- 3880, doi: 10.1002/cctc.201801542
40. Pappas, D. K., Martini A., Dyballa M., Kvande K., Teketel S., Lomachenko K. A., Baran R., Glatzel P., Arstad B., Berlier G., Lamberti C. (2019), Active Site for Methane to Methanol Conversion in Cu-Mordenite: A Quantitative Assessment. *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*, vol. 140, p. 15270-15278, ISSN: 0002-7863, doi: 10.1021/jacs.8b08071

41. Soldatov M. A., Martini A., Bugaev A. L., Pankin I., Medvedev P. V., Guda A. A., Aboraia A. M., Podkovyrina Y. S., Budnyk A. P., Soldatov A. V., Lamberti C. (2018). The insights from X-ray absorption spectroscopy into the local atomic structure and chemical bonding of Metal-organic frameworks. POLYHEDRON, vol. 155, p. 232-253, ISSN: 0277-5387, doi: 10.1016/j.poly.2018.08.004
42. Martini A., Alladio E., Borfecchia E. (2018). Determining Cu-Speciation in the Cu-CHA Zeolite Catalyst: The Potential of Multivariate Curve Resolution Analysis of In Situ XAS Data. TOPICS IN CATALYSIS, vol. 61, p. 1396-1407, ISSN: 1022-5528, doi: 10.1007/s11244-018-1036-9
43. Martini A., Borfecchia E., Lomachenko K. A., Pankin I. A., Negri C., Berlier G., Beato, P., Falsig, H., Bordiga, S., Lamberti C. (2017). Composition-driven Cu-speciation and reducibility in Cu-CHA zeolite catalysts: A multivariate XAS/FTIR approach to complexity. CHEMICAL SCIENCE, vol. 8, p. 6836-6851, ISSN: 2041-6520, doi: 10.1039/c7sc02266b
44. Pappas D. K., Borfecchia E., Dyballa M., Pankin I. A., Lomachenko K. A., Martini A., Signorile M., Teketel S., Arstad B., Berlier G., Lamberti C., Bordiga, Silvia, Olsbye, Unni, Lillerud, Karl Petter, Svelle, Stian, Beato, Pablo (2017). Methane to Methanol: Structure-Activity Relationships for Cu-CHA. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, vol. 139, p. 14961-14975, ISSN: 0002- 7863, doi: 10.1021/jacs.7b06472
45. Braglia L., Borfecchia E., Martini A., Bugaev A. L., Soldatov A. V., Øien- ødegaard S., Lønstad-bleken B. T., Olsbye U., Lillerud K. P., Lomachenko, K. A., Agostini G., Manzoli M., Lamberti C. (2017). The duality of UiO-67-Pt MOFs: connecting treatment conditions and encapsulated Pt species by operando XAS. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, vol. 19, p. 27489-27507, ISSN: 1463-9076, doi: 10.1039/c7cp05185a

Data

18/07/2024

Luogo

Berlino