PERSONAL INFORMATION

Corrado Cuocci

Via Marie Curie, 14 70056 Molfetta BA

(+39) 349 186 08 70 (+39) 080 592 91 61

corrado.cuocci@ic.cnr.it

Gender Male | Date of birth 23 07 1971 | Nationality Italiana

WORK EXPERIENCE

January 2008 – Present

Researcher (full time/permanent position)

Institute of Crystallography - National Research Council
Via Amendola 122/O Bari Italy

Main activities: development and implementation of innovative theoretical, methodological and computing tools in crystallographic software, devoted to the best interpretation of the experimental single crystal and powder diffraction information. The research activity has covered: indexing, space group determination, solution with traditional methods (direct methods and Patterson methods) and global optimization methods, completing and refining of crystal structure with Fourier and Rietveld analysis, development of graphic interface for the software distributed from IC. Dr. Cuocci is a co-author of important crystallographic computing programs widely used by the national and international scientific community: EXPO (structure determination from powder data), SIR (structure determination from single-crystal diffraction) and QUALX (qualitative phase analysis), OChemDb (crystallographic database). He has worked in the *ab initio* determination of many crystal structures from powder and single crystal data. Dr. Cuocci's research activity is documented by 60 scientific publications on international reviews (Acta Cryst. A, J. Appl. Cryst., Z. Kristallogr., Z. Kristallogr. NCS, Powder Diffr., Org. Lett., Tetrahedron, Croat. Chem., Catal. Today, CrystEngComm), communications in international and national conferences, many crystallographic and advanced numerical computing schools. For a complete list of publications see https://scholar.google.it/citations?hl=en&user=jfUpewoAAAAJ&view_op=list_works&sortby=pubdate

2000 - 2006

Temporary teaching activity in chemistry

Politecnico of Bari, Italy and Italian high school

EDUCATION AND TRAINING

June 14, 2002

Advanced course

Geomineralogical Department, University of Bari

Mineralogy and petrography applied in the study and recovery of cultural assets

From May 5 2000 to September 28 2000

PhD in Chemistry of Innovative Materials

Chemistry Department, University of Bari

Reduction of perfluoro compounds (PFC) emissions in microelectronics

From July 3 2000 to August 27 2000

Visiting scientist

Eindhoven University of Technology (Holland)

Plasma physics and technology

From January 10 2000 to September 30 2006

Research contract

Geomineralogical Department, University of Bari

Rietveld technical development in structural and material analysis

October 5, 2000 **Advanced course**

Chemistry Department, University of Bari

Enviromental pollution and residues in food

January 20, 2000 **Qualification to practise as chemist**

Chemistry Department, University of Bari

March 31, 1999 **Degree in chemistry**

University of Bari

Organic-biological studies

Degree with 110/110 cum laude

PERSONAL SKILLS

Computer skills

- Programming language: advanced knowledge of FORTRAN, significant knowledge of C++.
- Operating systems: good knowledge of Linux, basic knowledge of Windows and OS-X.
- Other programming skills: debugging, code optimization, parallel programming with MPI and OpenMP, version control system (Git,CVS).
- Computer Graphic Developer: experience in developing graphical interfaces based on the Qt framework, other graphical user interface libraries: GTK, Winteracter.

ADDITIONAL INFORMATION

Teaching & Lectures

- Global optimization methods for crystal structure solution from powder diffraction data, Fall Meeting of the European Materials Research Society (E-MRS), Symposium H: Modern computational methods and their applications in materials science: Synergy of theory and experiment (virtual conference) (20th September - 23th September 2021), (https://www.european-mrs.com/meetings/2021-fall-meeting)
- Direct space solution, Bari, Italy, EXPO&more International Workshop (30th September - 3th October 2019), (http://www.ba.ic.cnr.it/expo-more-workshop2019/program/)
- Rietveld refinement, Bari, Italy, EXPO&more International Workshop (30th September - 3th October 2019), (http://www.ba.ic.cnr.it/expo-more-workshop2019/program/)
- Tutorial Session: EXPO, AIC International Crystallography School (19th August - 2th September 2018), Bari, Italy (http://www.cristallografia.org/aicschool2018)
- Attività di docenza nell'ambito del progetto PON 'L'ordine nell'invisibile' presso Liceo scientifico Federico II di Svevia (Altamura - Bari). Materia di insegnamento: corso di introduzione alla cristallografia. Periodo di attività dal 13/12/2018 al 30/04/2019 (ore complessive 30).
- Structure solution from powder data, Bangalore, India - Crystallographic Computing School (15th-20th August 2017) (http://www.iucr.org/resources/commissions/crystallographic-computing/schools/bangalore2017)
- Direct space approach in action, European Crystallography School (ECS3), Bol, Croatia, September 25-October 2, 2016 (http://ecs3.ecanews.org/ECS3/PROGRAMME.html)
- Organization of 15th European Powder Diffraction Conference (EPDIC15), 12-15 June, 2016 (http://www.ba.ic.cnr.it/epdic15/)
- The EXPO program. Software Fayre, XLIV annual meeting of the Italian Crystallographic Association (AIC), Vercelli, Italy, September 14-18, 2015 (http://www.cristallografia.org/congresso2015/eng/detail.asp?idn=687)
- Expo2014: crystal structure solution from powder data. Software Fayre, 29th European Crystallographic Meeting (ECM29), Rovinj, Croatia, August 23-28, 2015 (http://ecm29.ecanews.org/luncheon-seminars/)
- Workshop and hands on: SIR/EXPO 2014. Federal University of São Carlos-SP, Brazil, November 3-7, 2014
- Organization of the International EXPO/SIR workshop. University of Bari, Italy. July 10-13, 2014.
- Hands on introduction to the program EXPO and SIR, International Workshop on Powder & Electron Crystallography, University of Patras, Greece, July 11, 2013 (https://crystallographypatras.wordpress.com/)
- Crystallographic study of PET radiotracers in clinical evaluation for early diagnosis of Alzheimer, 22nd Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting (CSCM 22), Biograd na Moru, Croatia, June 12-16, 2013
- C.Cuocci (2012). The powerful strategies of EXPO2011 for solving crystal structure by powder diffraction data, XLI annual meeting of the Italian Crystallographic Association (AIC), Verona, Italy, September 12, 2012

- Crystal Structure Determination by EXPO2010: demo. Software Fayre. 26th European Crystallographic Meeting (ECM26), Darmstadt, Germany, August 30, 2010
- Direct space approach in action, European Crystallography School (ECS3), Bol, Croatia, September 25-October 2, 2016 (http://ecs3.ecanews.org/ECS3/PROGRAMME.html)
- Organization of 15th European Powder Diffraction Conference (EPDIC15), 12-15 June, 2016 (http://www.ba.ic.cnr.it/epdic15/)
- The EXPO program. Software Fayre, XLIV annual meeting of the Italian Crystallographic Association (AIC), Vercelli, Italy, September 14-18, 2015 (http://www.cristallografia.org/congresso2015/eng/detail.asp?idn=687)
- Expo2014: crystal structure solution from powder data. Software Fayre, 29th European Crystallographic Meeting (ECM29), Rovinj, Croatia, August 23-28, 2015 (http://ecm29.ecanews.org/luncheon-seminars/)
- Workshop and hands on: SIR/EXPO 2014. Federal University of São Carlos-SP, Brazil, November 3-7, 2014
- Organization of the International EXPO/SIR workshop. University of Bari, Italy. July 10-13, 2014.
- Hands on introduction to the program EXPO and SIR, International Workshop on Powder & Electron Crystallography, University of Patras, Greece, July 11, 2013 (https://crystallographypatras.wordpress.com/)
- Crystallographic study of PET radiotracers in clinical evaluation for early diagnosis of Alzheimer, 22nd Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting (CSCM 22), Biograd na Moru, Croatia, June 12-16, 2013
- C.Cuocci (2012). The powerful strategies of EXPO2011 for solving crystal structure by powder diffraction data, XLI annual meeting of the Italian Crystallographic Association (AIC), Verona, Italy, September 12, 2012
- Crystal Structure Determination by EXPO2010: demo. Software Fayre. 26th European Crystallographic Meeting (ECM26), Darmstadt, Germany, August 30, 2010
- EXPO2009: structure solution by powder data. 2nd Meeting of the Italian and Spanish Crystallographic Associations (MISCA II), Oviedo, Spain, July 3, 2010
- Reciprocal and Direct Space Methods for Crystal Structure Solution in EXPO2009, computer session, Summer School on Polycrystalline Structure Determination, Zakopane, Poland, September 27, 2009
- Indexing and Space Group Determination by EXPO2009, computer session, Summer School on Polycrystalline Structure Determination, Zakopane, Poland, September 27, 2009
- Direct Space Methods in EXPO2009, XXXVIII annual meeting of the Italian Crystallographic Association (AIC), Salerno, Italy, September 22, 2009
- Simulated Annealing, International Workshop PHARE2009, a modular workshop on global PHAse Retrieval, Martina Franca, Italy, April 15-24, 2009

Recent Scientific Projects

- **Titolo progetto:** Unlocking Sustainable Technologies Through Nature-Inspired Solvents - (NATUREChem)
  Tipologia/finanziamento PRIN-MIUR (bando 2017)
  Ruolo svolto: Partecipante Unità Operativa
  Importo totale finanziamento: 607.700 (euro); contributo MIUR 440.000 (euro)
  Importo finanziamento per Unità Operativa: costo totale 150.896 (euro); contributo MIUR 111.589 (euro)
  N. contratto: 2017A5HXFC_005
  Data: 31 Luglio 2019
  Nominativo coordinatore del progetto: Prof. Maurizio Benaglia (Università di Milano)
  Altri partner italiani o stranieri del progetto: Università di Bari, Università di Camerino, Università di Milano-Bicocca
  Finalità del progetto: Il Progetto NATUREChem ha come obiettivo lo sviluppo di una tecnologia innovativa e più ecologica basata sull'uso di solventi e mezzi non convenzionali, ecologici, puliti e che imitano la natura (i cosiddetti solventi eutettici profondi, DES) per un progresso della conoscenza e per uno sviluppo sostenibile di (a) processi organo, bio- e metallo-catalizzati, (b) trasformazioni organiche mediate da composti organometallici altamente polari, (c) protocolli a base biologica, in batch e in flusso, per la preparazione di eterocicli di rilevanza farmaceutica, e (d) tecnologie solari di nuova concezione basate su coloranti innovativi per la generazione di elettricità e combustibili dalla luce solare e da fonti pulite, abbondanti e rinnovabili. Nell'ambito dell'Unità CNR, il progetto si propone di comprendere il meccanismo d'azione dei reagenti organometallici polari nei DES attraverso un approccio globale comprendente lo studio di fasi solide (tramite cristallografia a raggi X) e in soluzione (tramite studi NMR avanzati).

- **Title:** Utilizing parallel computing for crystal structure solution from X-ray powder diffraction data (PSSPD).
  Tipologia: Italian SuperComputing Resource Allocation – ISCRA Class C
  Personal investigator: C. Cuocci.
  Research group: A. Altomare, N. Corriero, R. Rizzi, A. Moliterni, A. Falcicchio.
  Validity: Thursday, 6 July, 2017 to Friday, 6 April, 2018
  Hardware resources: Marconi KNL partition, CINECA.
  Budget: 12500 hours
  Riferimenti: Project: IsC53 AcountID: PSSPD OriginID: HP10CQK3FF
  Finalità del progetto: Utilizzare le risorse di calcolo del CINECA per testare la versione parallela del programma Expo2014

- **Progetto bilaterale CNR/CNRST**
  Ruolo svolto: Partecipante Progetto
  Titolo progetto: Nuovi biomateriali Ca9REE(PO4)7: sintesi e caratterizzazione strutturale tramite approccio multimetodologico di tecniche di raggi X
  Tipologia/finanziamento Progetto bilaterale CNR/CNRST 2016-2017 (Marocco)
  Importo totale finanziamento: 8000 euro
  Importo finanziamento per Unità Operativa: 4000 euro
  N. contratto: B92F16000120005
  Data: 18/04/2016
  Nominativo coordinatore del progetto: Francesco Capitelli
  Altri partner italiani o stranieri del progetto: Chemistry Department, Faculté des Sciences Semlalia: Cadi Ayyad University, Marrakech, Morocco
  Finalità del progetto: 1) Sintesi di alta temperatura di biomateriali Ca 3 (PO 4) 2 tricalcium fosfati (TCP) dopati con cationi di terre rare, per applicazioni ottiche e biomediche; 2) Caratterizzazione strutturale delle fasi ottenute tramite diffrazione da raggi X, microscopia SEM, tecniche spettroscopiche vibrazionali (FTIR, Raman) e di luminescenza. 3) Compartecipazione di know-how tra i due partners internazionali per la sintesi e la caratterizzazione di nuovi biomateriali TCP e calcio fosfati
  Link: https://www.cnr.it/it/accordi-bilaterali/progetto/2246/nuovi-biomateriali-ca9ree-po4-7-sintesi-e-caratterizzazione-strutturale-tramite-approccio-multimetodologico-di-tecniche-di-raggi-x

- **Titolo:** Microtecnologie e moderne tecniche spettroscopiche e diffrattometriche per lo sviluppo e la razionalizzazione di processi di sintesi stereoselettivi ecosostenibili
  Tipologia: Progetto MIUR – FIRB 2008 - Programma Futuro in Ricerca
  Qualifica del sottoscritto: Responsabile Scientifico dell'Unità di Ricerca dell'Istituto di Cristallografia
  Importo totale finanziamento: 525.000 euro
  Importo finanziamento per Unità Operativa: 123.200 euro
  Codice Progetto: RBFR083M5N_002
  Inizio progetto: 1 dicembre 2010
  Durata: 3 anni
  Personale dell'IC coinvolto nel progetto: A. Moliterni, S. Maggi, B. Aresta, R. Rizzi, C. Cuocci, F. Capitelli, A. Altomare.
  Finalità del progetto: Sviluppo di processi di sintesi stereoselettiva mediante: 1.Uso di microtecnologie (es. microreattori) efficienti ed ecosostenibili. 2.Sviluppo di nuove metodologie di sintesi usando solventi e/o reagenti ecosostenibili. 3.Studio e caratterizzazione strutturale di specie reattive utili per realizzare processi stereocontrollati.
  Enti coinvolti nel progetto: a) Unità afferente al Dipartimento Farmaco – Chimico dell'Università degli Studi di Bari, coordinata dal Prof. Renzo Luisi. b) Unità afferente all'Istituto di Cristallografia del CNR di Bari, coordinata dal Dr. Corrado Cuocci. c) Unità afferente al Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Cagliari, coordinata dal Dr. Francesco Secci.

- **Titolo progetto:** Ingegnerizzazione e sviluppo di catalizzatori molecolari o nano-strutturati e di strategie sintetiche sostenibili (alta conversione e selettivitá) ed eco-compatibili per la produzione di sistemi molecolari multifunzionali di alto interesse applicativo mediante assemblaggio in sequenza ordinata di unitá semplici
  Tipologia: PRIN 2008
  Qualifica del sottoscritto: vice responsabile dell'unita IC
  Coordinatore nazionale: Bartolo Gabriele (Universitá della Calabria)
  Responsabile IC: Sabino Maggi
  Personale dell'IC coinvolto nel progetto: S. Maggi, B. Aresta, C. Cuocci, G. Chita
  Titolo IC: "Analisi strutturale di sistemi catalitici eterogenei mediante tecnologie avanzate di diffrazione a raggi X"
  N. contratto: PM.P06.002 / Metodologie Cristallografiche, codice progetto 2008A7PYJ_004
  Importo totale finanziamento: 150.000,00 euro
  Importo finanziamento per Unità Operativa: 22.143,00 euro
  Inizio progetto: 15 febbraio 2010 Durata: 24 mesi
  Enti coninvolti nel progetto: a)Universitá della Calabria, Dipartimento di Scienze Farmaceutiche a)Universitá di Bari, Dipartimento di Chimica b)Universitá di Parma, Dipartimento di Chimica c)Universitá di Urbino, Dipartimento di Chimica d)Universitá di Bologna, Dipartimento di Chimica
  Finalità del progetto: caratterizzazione mediante raggi X di nuovi sistemi catalitici e studio della correlazione struttura-reattività

- **Titolo progetto:** IT@CHA – Tecnologie Italiane per applicazioni avanzate nei Beni Culturali
  Tipologia: Programma Operativo Nazionale (PON) "Ricerca e Competitività 2007-2013" Regioni Convergenza
  Ruolo svolto: Partecipante Progetto
  Codice Progetto:PON01_00625
  Data: dal 01-07-2011 al 31-10-2015
  Soggetti proponenti: CETMA,Infobyte@ srl,Quadra T.V. scarl, AGEOTEC srl, Dipietro Group srl, TERIN,SIPRE srl, TechLab Works sas, Caccavo srl, Cultura e Innovazione S. c. a r. l. - Distretto tecnologico dei beni culturali della Calabria, CNR-INO-ISTM-IC, ENEA, Università del Salento, Università di Palermo, Università della Calabria
  Responsabile del progetto: 1) Per il Consorzio CETMA (soggetto coordinatore) Ing. Lucio COLIZZI 2) Per il CNR Dott. Luca PEZZATI Responsabile UOS Lecce
  Finalità del progetto: L'obiettivo finale del progetto è lo studio, la messa a punto prototipale e la sperimentazione di tecnologie (strumenti e sistemi) e metodologie (procedure e linee guida) innovative che trovano applicazione in diverse fasi del processo di gestione del bene culturale. Le fasi a cui si fa riferimento sono: 1) lo studio storico tecnico 2) la diagnosi 3) intervento 4) il monitoraggio conservativo 5) la musealizzazione e la fruizione 6) la valorizzazione. In ogni fase sopra indicata, IT@CHA propone soluzioni tecnologiche in grado di supportare tecnici, operatori, enti tutelanti e singoli interessati come i cittadini e turisti nel complesso processo del rapportarsi al bene culturale, ora per misurare, ora per valutare ora per fruirne e comprenderlo.
  Sito web: http://www.ponrec.it/open-data/progetti/scheda-progetto?ProgettoID=5027

- **Ruolo svolto:** Partecipante Unità Operativa
  Titolo progetto: Studio cristallografico di radiotraccianti PET in valutazione clinica per la diagnosi precoce dell'Alzheimer
  Importo totale finanziamento: 100.000 euro
  Importo finanziamento per Unità Operativa: 50.000 euro
  Data: 05/07/2012
  Nominativo coordinatore del progetto: Rosanna Rizzi (IC-CNR)
  Altri partner italiani o stranieri del progetto: Cassa di Risparmio di Puglia; Università degli studi di Bari
  Finalità del progetto: Studi cristallografici e biologici di radiotraccianti PET per la diagnosi precoce dell'Alzheimer
  Periodo di attività: dal 01/10/2012 al 30/09/2012

Participation in Schools and Congresses

- **Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling**
  The training took place from September 16 to September 20, 2019 in the lecture hall of Jožef Stefan Institute (JSI), Jamova 39, Ljubljana, Slovenia. http://qe2019.ijs.si/index.html
- **Introduction to Scientific and Technical Computing in C++**
  The training took place from April 08 to April 10, 2019 at the offices of CINECA - Milano offices. https://eventi.cineca.it/en/hpc/introduction-scientific-and-technical-computing-c/milano-20190408
- **Summer School on Parallel Computing**
  The training took place from July 09 to July 20, 2018 at the offices of CINECA - Roma. https://eventi.cineca.it/en/hpc/summer-school-parallel-computing/roma-20180709
- **Analisi quantitativa di fasi cristalline: metodi tradizionali e chemiometria a confronto**
  The training took place February 6, 2018, Bologna, https://chemiometria2017.wordpress.com/
- **Introduction to Parallel Computing with MPI and OpenMP**
  The training took place from November 22 to November 24, 2017 at CINECA - Milano offices.
- **Introduction to Marconi KLN cluster, for users and developers**
  The training took place on October, 23 rd 2017 at CINECA - Rome
- **Corso intensivo di programmazione di schede grafiche utilizzando CUDA**
  The training took place from May 11 to May 13, 2016 at ReCaS Bari, https://www.recas-bari.it/index.php/it/recas-bari-formazione
- **Introduction to Modern Fortran**
  The training took place from January 19 to January 22, 2015 at CINECA, Roma
- **22nd Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting (CSCM 22)**
  The congress took place at Biograd na Moru, Croatia, June 12-16, 2013
- **International Workshop on Powder & Electron Crystallography**
  The training took place at University of Patras, Greece, July 8-12, 2013
- **Calcolo scientifico e tecnico in linguaggio C++**
  The training took place from December 11 to December 14, 2012 at CINECA Consorzio Interuniversitario, Rome
- **Calcolo scientifico e tecnico in linguaggio C**
  The training took place from March 27 to March 30, at CINECA, Rome
- **Tecniche e strumenti per la programmazione scientifica in ambiente HPC**
  The training took place from May 4 to May 6, 2011 at CINECA, Casalecchio di Reno (Bologna)
- **Corso CMS "Drupal 6" - Tecniche di base**
  The training took place from April 12 to April 14, 2010 at CNR - Sede Centrale, Rome
- **Corso di Formazione "Amministratori di Sistemi e di Infrastrutture ICT"**
  The training took place from November 9 to November 13, 2009 at Area della ricerca del CNR di Pisa, 9-13 novembre 2009
- **Scuola Estiva di Calcolo Numerico Avanzato (IV edizione)**
  The training took place from September 1 to September 12, 2008 at CASPUR, Villa Fiorio, Grottaferrata (Rome) 1-12 settembre 2008
- **Scuola Estiva di Calcolo Parallelo**
  The training took place from September 3 to September 14, 2007 at CINECA, Bologna
- **Scuola Estiva di Visualizzazione Scientifica e Grafica Interattiva 3D**
  The training took place from October 18 to October 29, 2006 at CINECA, Bologna
- **Scuola di Diffrazione da Materiali Policristallini**
  The training took place from June 26 to June 30, 2006 at Martina Franca (Taranto)
- **Scuola AIC 2003 su "Syncroton Light and X-rays: Theory and applications"**
  The training took place from July 20 to July 21, 2003 at Trieste,
- **Scuola AIC 2002 su "Il Problema della Fase in Cristallografia: Teoria e Applicazioni"**
  The training took place from September 23 to September 24, 2002 at Bressanone
- **Master Class on Hot Topics in Plasma Physics and Thechnology**
  The training took place from July 12 to July 14, 2000 at Eindhoven
- **Corso su "Low Temperature Plasma Physics"**
  The training took place from July 4 to July 11, 2000 at Eindhoven

PUBLICATIONS

2021

- Veltri, L.; Amuso, R.; Petrilli, M.; Cuocci, C.; Chiacchio, M. A.; Vitale, P. & Gabriele, B. (2021), 'A Zinc-Mediated Deprotective Annulation Approach to New Polycyclic Heterocycles', *Molecules*, **26**, 2318. DOI:10.3390/molecules26082318

2021
- Mancuso, R.; Ziccarelli, I.; Novello, M.; Pomelli, C. S.; Cuocci, C.; Centore, R.; Della Ca', N.; Olivieri, D.; Carfagna, C. & Gabriele, B. (2021), 'A palladium iodide catalyzed regioselective carbonylative route to isocoumarin and thienopyranone carboxylic esters', *Journal of Catalysis*, **405**, 164-182. DOI:10.1016/j.jcat.2021.11.028
- Veltri, L.; Amuso, R.; Petrilli, M.; Cuocci, C.; Chiacchio, M.A.; Vitale, P. & Gabriele, B. (2021), 'A Zinc-Mediated Deprotective Annulation Approach to New Polycyclic Heterocycles', *Molecules*, **26**, 2318. DOI:10.3390/molecules26082318

2020
- Mancuso, R.; Ziccarelli, I.; Pomelli, C. S.; Cuocci, C.; Della Ca', N.; Olivieri, D.; Carfagna, C. & Gabriele, B. (2020), 'Unprecedented cooperative DBU-CuCl2 catalysis for the incorporation of carbon dioxide into homopropargylic amines leading to 6-methylene-1,3-oxazin-2-ones', *Journal of Catalysis*, **387**, 145-153. DOI:10.1016/j.jcat.2020.03.033
- Altomare, A.; Corriero, N.; Cuocci, C.; Falcicchio, A. & Rizzi, R. (2020), 'Solving a Structure in the Reciprocal Space, Real Space and Both by Using the EXPO Software', *Crystals*, **10**(1), 16. DOI:10.3390/cryst10010016
- Burazer, S.; Popović, J.; Jagličić, Z.; Jagodič, M.; Šantić, Ana; Altomare, A.; Cuocci, C.; Corriero, N. & Vrankić, M. (2020), 'Magnetoelectric Coupling Springing Up in Molecular Ferroelectric: [N(C2H5)3CH3][FeCl4]', *Inorg. Chem.*, **59**(10), 6876-6883. DOI:10.1021/acs.inorgchem.0c00288

2019
- Yahiaoui, S.; Moliterni, A.; Corriero, N.; Cuocci, C.; Toubal, K.; Chouaih, A.; Djafri, A. & Hamzaoui, F. (2019), '2-thioxo- 3N-(2-methoxyphenyl) -5 [4'-methyl -3'N-(2'-methoxyphenyl) thiazol-2'(3'H)-ylidene] thiazolidin-4-one: Synthesis, characterization, X-ray single crystal structure investigation and quantum chemical calculations', *Journal of Molecular Structure*, **1177**, 186-192. DOI:10.1016/j.molstruc.2018.09.052
- Veltri, L.; Amuso, R.; Cuocci, C.; Vitale, P. & Gabriele, B. (2019), 'Palladium-Catalyzed Cyclocarbonylation Approach to Thiadiazafluorenones: A Correction', *J. Org. Chem.*, **84**(13), 8743-8749. DOI:10.1021/acs.joc.9b01043

2018
- Altomare, A.; Corriero, N.; Cuocci, C.; Falcicchio, A.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2018), 'OChemDb: the free online Open Chemistry Database portal for searching and analysing crystal structure information', *J. Appl. Cryst.*, **51**, 1229-1236. DOI:10.1107/S1600576718008166
- Altomare, A.; Capitelli, F; Corriero, N.; Cuocci, C.; Falcicchio, A.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2018), 'The Rietveld Refinement in the EXPO Software: A Powerful Tool at the End of the Elaborate Crystal Structure Solution Pathway', *Crystals*, **8**(5), 1-18. DOI:10.3390/cryst8050203
- Altomare, A.; Corriero, N.; Cuocci, C.; Falcicchio, A.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2018), 'Direct-space solution in the *EXPO* package: the combination of the HBB-BC algorithm with GRASP', *J. Appl. Cryst.*, **51**, 505-513. DOI:10.1107/S1600576718002984
- Mancuso, R.; Veltri, L.; Russo, P.; Grasso, G.; Cuocci, C.; Romeo, R. & Gabriele, B.(2018), 'Palladium-Catalyzed Carbonylative Synthesis of Functionalized Benzimidazopyrimidinones', *Synthesis*, **50**, 267-277. DOI:10.1055/s-0036-1591835

2017
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Moliterni, A.; Rizzi, R.; Corriero, N. & Falcicchio, A. (2017), 'The Shift_and_Fix procedure in *EXPO*: advances for solving *ab initio* crystal structures by powder diffraction data', *J. Appl. Cryst.*, **50**, 1812-1820. DOI:10.1107/S1600576717015400
- Altomare, A.; Corriero, N.; Cuocci, C.; Falcicchio, A.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2017), 'Main features of *QUALX2.0* software for qualitative phase analysis', *Powder Diffr.*, **32**(S1), S129-S134. DOI:10.1017/S0885715617000240
- Caliandro, R.; Belviso, B.; Cuocci, C.; Fuertes, S.; Sicilia, V.; Hanson, J.; Tutuncu, G.; Doorhyee, E. & Altomare, A. (2017), 'Dynamic characterization of structural changes in vapochromic compounds by pair distribution function', *Powder Diffr.*, **32**(S1), S118-S122. DOI:10.1017/S0885715617000094
- Altomare, A.; Ciriaco, F.; Cuocci, C.; Falcicchio, A. & Fanelli, F. (2017), 'Combined powder X-ray diffraction data and quantum-chemical calculations in EXPO2014', *Powder Diffr.*, **32**(S1), S123-S128. DOI:10.1017/S088571561700015X

2016
- Ventruti, G.; Schingaro, E.; Monno, A.; Lacalamita, M.; Ventura, G.; Bellatreccia, F.; Cuocci, C.; Rossi, M. & Capitelli, F. (2016), 'Structure refinement and vibrational spectroscopy of vauxite from the type locality, Llallagua (Bolivia)', *Canadian Mineralogist*, **54**(1), 163-176. DOI:10.3749/canmin.1500060
- Volpe, A.; Pagano, M.; Pastore, C.; Cuocci, C. & Milella, A. (2016), 'Sorption properties of an amorphous hydroxo titanate towards Pb^{2+}, Ni^{2+}, and Cu^{2+} ions in aqueous solution', *Journal of Environmental Science and Health - Part A Toxic/Hazardous Substances and Environmental Engineering*, **51**(13), 1121-1130. DOI:10.1080/10934529.2016.1199885

2015
- Altomare, A.; Corriero, N.; Cuocci, C.; Falcicchio, A.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2015), '*QUALX2.0*: A qualitative phase analysis software using the freely available database POW_COD', *J. Appl. Cryst.*, **48**, 598-603. DOI:10.1107/S1600576715002319
- Falcicchio, A.; Nilsson Lill, S.; Perna, F.; Salomone, A.; Coppi, D.; Cuocci, C.; Stalke, D. & Capriati, V. (2015), 'Organotrifluoroborates as attractive self-assembling systems: the case of bifunctional dipotassium phenylene-1,4-bis(trifluoroborate)', *Dalton Transactions*, **44**(45), 19447-19450. DOI:10.1039/c5dt02020d
- Altomare, A.; Corriero, N.; Cuocci, C.; Falcicchio, A.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2015), 'EXPO software for solving crystal structures by powder diffraction data: Methods and application', *Crystal Research and Technology*, **50**(9-10), 737-742. DOI:10.1002/crat.201500024
- Burla, M.; Caliandro, R.; Carrozzini, B.; Cascarano, G.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Mallamo, M.; Mazzone, A. & Polidori, G. (2015), 'Crystal structure determination and refinement *via SIR2014*', *J. Appl. Cryst.*, **48**(1), 306-309. DOI:10.1107/S1600576715001132

2014
- Carroccia, L.; Degennaro, L.; Romanazzi, G.; Cuocci, C.; Pisano, L. & Luisi, R. (2014), 'Straightforward access to 4-membered sulfurated heterocycles: Introducing a strategy for the single and double functionalization of thietane 1-oxide', *Organic and Biomolecular Chemistry*, **12**(14), 2180-2184. DOI:10.1039/c4ob00173g

2013
- Altomare, A.; Corriero, N.; Cuocci, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2013), 'The hybrid big bang-big crunch method for solving crystal structure from powder diffraction data', *J. Appl. Cryst.*, **46**(3), 779-787. DOI:10.1107/S0021889813010571
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2013), 'RAMM: A new random-model-based method for solving *ab initio* crystal structure using the *EXPO* package', *J. Appl. Cryst.*, **46**(2), 476-482. DOI:10.1107/S0021889813002227
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A.; Rizzi, R.; Corriero, N. & Falcicchio, A. (2013), '*EXPO2013*: A kit of tools for phasing crystal structures from powder data', *J. Appl. Cryst.*, **46**(4), 1231-1235. DOI:10.1107/S0021889813013113

2012
- Braga, D.; Grepioni, F.; Maini, L.; Lampronti, G.; Capucci, D. & Cuocci, C. (2012), 'Structure determination of novel ionic co-crystals from powder data: The use of rigid fragments in simulated annealing algorithms', *CrystEngComm*, **14**(10), 3521-3527. DOI:10.1039/c2ce25057h
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2012), 'Covariance and correlation estimation in electron-density maps', *Acta Cryst.*, A**68**(2), 244-255. DOI:10.1107/S0108767311053281
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2012), 'COVMAP: A new algorithm for structure model optimization in the *EXPO* package', *J. Appl. Cryst.*, **45**(4), 789-797. DOI:10.1107/S002188981201953X

2011
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2011), 'Obtaining models suitable for Rietveld refinement: The *EXPO2011* techniques', *Z. Kristallogr.*, **226**(12), 869-881. DOI:10.1524/zkri.2011.1420
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2011), 'EXPO2011: A new package for powder crystallography', *Powder Diffr.*, **26**(S1), S2-S12. DOI:10.1154/1.3660382
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2011), 'Advances in the *EXPO2009* systematic decomposition procedure: An atom-matching-based figure of merit', *J. Appl. Cryst.*, **44**(3), 448-453. DOI:10.1107/S0021889811010727

2010
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2010), 'The main strategies and tools in EXPO2009', *Solid State Phenomena*, **163**, 1-8. DOI:10.4028/www.scientific.net/SSP.163.1
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2010), 'The dual-space resolution bias correction in *EXPO2010*', *Z. Kristallogr.*, **225**(12), 548-551. DOI:10.1524/zkri.2010.1352
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2010), 'The dual-space resolution bias correction algorithm: Applications to powder data', *J. Appl. Cryst.*, **43**(4), 798-804. DOI:10.1107/S0021889810015499

2009
- Giacovazzo, C.; Halasz, I.; Lapidus, S.; Louwen, J.; Moliterni, A.; Palatinus, L.; Rizzi, R.; Schilder, E.; Stephens, P.; Stone, K. & Van Mechelen, J. (2009), 'Third structure determination by powder diffractometry round robin (SDPDRR-3)', *Powder Diffr.*, **24**(3), 254-262. DOI:10.1154/1.3200881
- Degennaro, L.; Capriati, V.; Carlucci, C.; Florio, S.; Luisi, R.; Nuzzo, I. & Cuocci, C. (2009), 'Terminal oxazolinyloxiranes: synthesis, reaction with amines and regioselective β-lithiation', *Tetrahedron*, **65**(42), 8745-8755. DOI:10.1016/j.tet.2009.08.040
- Altomare, A.; Belviso, B.; Burla, M.; Campi, G.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Gozzo, F.; Moliterni, A.; Polidori, G. & Rizzi, R. (2009), 'Multiple-wavelength anomalous dispersion techniques applied to powder data: A probabilistic method for finding the substructure via joint probability distribution functions', *J. Appl. Cryst.*, **42**(1), 30-35. DOI:10.1107/S0021889808039538
- Altomare, A.; Burla, M.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Gozzo, F.; Moliterni, A.; Polidori, G. & Rizzi, R. (2009), 'MAD techniques applied to powder data: Finding the structure given the substructure', *Acta Cryst.*, A**65**(4), 291-299. DOI:10.1107/S0108767309016304
- Altomare, A.; Camalli, M.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2009), '*EXPO2009*: Structure solution by powder data in direct and reciprocal space', *J. Appl. Cryst.*, **42**(6), 1197-1202. DOI:10.1107/S0021889809042915
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Maggi, S.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2009), 'Correcting electron-density resolution bias in reciprocal space', *Acta Cryst.*, A**65**(3), 183-189. DOI:10.1107/S0108767309003687
- Altomare, A.; Campi, G.; Cuocci, C.; Eriksson, L.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A.; Rizzi, R. & Werner, P.-E. (2009), 'Advances in powder diffraction pattern indexing: *N-TREOR09*', *J. Appl. Cryst.*, **42**(5), 768-775. DOI:10.1107/S0021889809025503

2008
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2008), '*QUALX*: A computer program for qualitative analysis using powder diffraction data', *J. Appl. Cryst.*, **41**(4), 815-817. DOI:10.1107/S0021889808016956
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2008), 'New features in EXPO2007, a program for crystal structure resolution from powder data', *Croatica Chemica Acta*, 81(2), 401-407.
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Kamel, G.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2008), 'Minimally resolution biased electron-density maps', *Acta Cryst.*, A**64**(2), 326-336. DOI:10.1107/S0108767308004303
- Altomare, A.; Caliandro, R.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A.; Rizzi, R. & Platteau, C. (2008), 'Direct methods and simulated annealing: A hybrid approach for powder diffraction data', *J. Appl. Cryst.*, **41**(1), 56-61. DOI:10.1107/S0021889807054192
- Capriati, V.; Degennaro, L.; Florio, S.; Luisi, R.; Cuocci, C. & Campi, G. (2008), 'Crystal structure of (+)-(2S,3S,1'*S*)-2-ethyl-*N*-(1-hydroxymethyl-2-methylpropyl)-2-methyl-3-phenyl-3-phenylaminopropanamide, $C_{23}H_{32}N_2O_2$', *Z. Kristallogr. - New Crystal Structures*, **223**(4), 481-482. DOI:10.1524/ncrs.2008.0211
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2008), 'Correcting resolution bias in electron density maps of organic molecules derived by direct methods from powder data', *J. Appl. Cryst.*, **41**(3), 592-599. DOI:10.1107/S0021889808011527
- Aresta, M.; Dibenedetto, A.; Pastore, C.; Cuocci, C.; Aresta, B.; Cometa, S. & De Giglio, E. (2008), 'Cerium(IV)oxide modification by inclusion of a hetero-atom: A strategy for producing efficient and robust nano-catalysts for methanol carboxylation', *Catalysis Today*, **137**(1), 125-131. DOI:10.1016/j.cattod.2008.04.043

2007
- Altomare, A.; Caliandro, R.; Camalli, M.; Cuocci, C.; Da Silva, I.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2007), 'EXPO2006: A tool for powder crystallography', *Solid State Phenomena*, **130**, 21-26. DOI:10.4028/3-908451-40-x.21
- Altomare, A.; Camalli, M.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2007), 'Direct methods and the solution of organic structures from powder data', *J. Appl. Cryst.*, **40**(2), 344-348. DOI:10.1107/S0021889807006358
- Capriati, V.; Degennaro, L.; Florio, S.; Luisi, R. & Cuocci, C. (2007), 'Asymmetric synthesis of α,β-substituted β-aminoalkanamides and stereochemical determination', *Tetrahedron Letters*, **48**(49), 8655-8658. DOI:10.1016/j.tetlet.2007.10.035
- Altomare, A.; Camalli, M.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2007), 'Advances in space-group determination from powder diffraction data', *J. Appl. Cryst.*, **40**(4), 743-748. DOI:10.1107/S0021889807027501

2006
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, G. & Rizzi, R. (2006), 'The combined use of Patterson and Monte Carlo methods for the decomposition of a powder diffraction pattern', *J. Appl. Cryst.*, **39**(2), 145-150. DOI:10.1107/S0021889805041798
- Capriati, V.; Florio, S.; Luisi, R.; Salomone, A. & Cuocci, C. (2006), 'Stereoselective synthesis of novel β,γ-epoxyhydroxylamines and 4-hydroxyalkyl-1,2-oxazetidines', *Organic Letters*, **8**(18), 3923-3926. DOI:10.1021/ol061256y
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Giuseppina Moliterni, A. & Rizzi, R. (2006), 'Powder diffraction: The new automatic least-squares Fourier recycling procedure in *EXPO2005*', *J. Appl. Cryst.*, **39**(4), 558-562. DOI:10.1107/S0021889806017912
- Florio, S.; Capriati, V.; Luisi, R.; Salomone, A. & Cuocci, C. (2006), 'Crystal structure of (*N-tert-butyl*-3,4-diplienyl-1,2-oxazetidin-4-yl)metlianol, $C_{19}H_{23}NO_2$', *Z. Kristallogr. - New Crystal Structures*, **221**(1-4), 398-400. DOI:10.1524/ncrs.2006.221.14.398

2005
- Altomare, A.; Camalli, M.; Cuocci, C.; Da Silva, I.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2005), 'Space group determination: Improvements in *EXPO2004*', *J. Appl. Cryst.*, **38**(5), 760-767. DOI:10.1107/S0021889805020820
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Da Silva, I.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2005), 'Full powder pattern decomposition and direct phasing in EXPO2004: A statistical study', *Powder Diffr.*, **20**(4), 327-333. DOI:doi.org/10.1154/1.2136889

2004
- Altomare, A.; Caliandro, R.; Camalli, M.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Giuseppina Moliterni, A.; Rizzi, R.; Spagna, R. & Gonzalez-Platas, J. (2004), 'Towards EXPO2005', *Z. Kristallogr.*, **219**(12), 833-837. DOI:10.1524/zkri.219.12.833.55860
- Altomare, A.; Caliandro, R.; Cuocci, C.; Da Silva, I.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2004), 'The use of error-correcting codes for the decomposition of a powder diffraction pattern', *J. Appl. Cryst.*, **37**(2), 204-209. DOI:10.1107/S002188980302908X
- Altomare, A.; Caliandro, R.; Camalli, M.; Cuocci, C.; Da Silva, I.; Giacovazzo, C.; Giuseppina Moliterni, A. & Spagna, R. (2004), 'Space-group determination from powder diffraction data: A probabilistic approach', *J. Appl. Cryst.*, **37**(6), 957-966. DOI:10.1107/S0021889804023982
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Grazia, A.; Moliterni, G. & Rizzi, R. (2004), 'Completion of Crystal Structure with Polyhedral Coordination: A New Procedure', *Materials Science Forum*, 443-444, 23-26.
- Altomare, A.; Caliandro, R.; Camalli, M.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2004), 'Automatic structure determination from powder data with *EXPO2004*', *J. Appl. Cryst.*, **37**(6), 1025-1028. DOI:10.1107/S0021889804021417

2003
- Altomare, A.; Caliandro, R.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2003), 'A systematic procedure for the decomposition of a powder diffraction pattern', *J. Appl. Cryst.*, **36**(3), 906-913. DOI:10.1107/S0021889803004655

2002
- Altomare, A.; Cuocci, C.; Giacovazzo, C.; Guagliardi, A.; Moliterni, A. & Rizzi, R. (2002), 'Real-space technique applied to crystal structure determination from powder data', *J. Appl. Cryst.*, **35**(2), 182-184. DOI:10.1107/S0021889801021689
- Giacovazzo, C.; Capitelli, F.; Cuocci, C. & Ianigro, M. (2002), 'Direct methods and applications to electron crystallography', *Advances in Imaging and Electron Physics*, **123**(C), 291-310. DOI:10.1016/S1076-5670(02)80067-2
- Giacovazzo, C.; Altomare, A.; Cuocci, C.; Giuseppina Moliterni, A. & Rizzi, R. (2002), 'Completion of crystal structure by powder diffraction data: A new method for locating atoms with polyhedral coordination', *J. Appl. Cryst.*, **35**(4), 422-429. DOI:10.1107/S0021889802006556

2001
- Fini, P.; Castagnolo, M.; Cuocci, C. & Trotta, M. (2001), 'Transfer of coenzyme Q0 from water to aqueous surfactant solutions: The case of Triton X-100', *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, **20**(1), 27-35. DOI:10.1016/S0927-7765(00)00152-1

CHAPTERS OF BOOKS

2019
- Altomare, A., Cuocci, C., Moliterni, A., Rizzi, R., (2019), 'Solving crystal structures using reciprocal-space methods', In *International Tables for Crystallography, Volume H: Powder Diffraction*, Eds. Christopher J. Gilmore, James A. Kaduk and Henk Schenk, Vol. H, ch. 4.2, pp. 395-413. ISBN: 978-1-118-41628-0 DOI:10.1107/97809553602060000957
  Description of the volume: Powder diffraction is the mostly widely used crystallographic method, with applications spanning all aspects of structural science. This new volume of International Tables for Crystallography covers all aspects of the technique with over 50 chapters written by experts in the field. (http://www.iucr.org/resources/commissions/international-tables/new-volumes-and-editions)
- Altomare, A., Cuocci, C., Moliterni, A., Rizzi, R., (2019), 'Indexing a powder diffraction pattern', In *International Tables for Crystallography, Volume H: Powder Diffraction*, Eds. Christopher J. Gilmore, James A. Kaduk and Henk Schenk, ch. 3.4, pp. 270-281. ISBN: 978-1-118-41628-0 DOI:10.1107/97809553602060000949
  Description of the volume: Powder diffraction is the mostly widely used crystallographic method, with applications spanning all aspects of structural science. This new volume of International Tables for Crystallography covers all aspects of the technique with over 50 chapters written by experts in the field. (http://www.iucr.org/resources/commissions/international-tables/new-volumes-and-editions)

2017
- Altomare, A., Cuocci, C., Gatta, G.D., Moliterni, A., Rizzi, R. (2017), 'Methods of crystallography: powder X-ray diffraction', *EMU Notes in Mineralogy*, **Vol. 19**, Chapter 2, 79-138. ISBN: 978-0903059-5 DOI:10.1180/EMU-notes.19.3

2015
- Altomare, A., Corriero, N., Cuocci, C., Falcicchio, A., Moliterni, A., Rizzi, R. (2017), 'Caratterizzazione di materiali cristallini di interesse per i Beni Culturali mediante diffrazione di raggi X da polveri", in Preservation and Enhancement of Cultural Heritage - The "T.He.T.A." Project and research experiences in the European context', *Proceed. Intern. Conf., Gioia del Colle, October 21-22, 2014*, 127-139, CNR edizioni, Roma, Agosto 2015. ISBN: 978-88-8080-186-3

2013
- Altomare, A., Cuocci, C., Moliterni, A., Rizzi, R. (2013), 'Single crystal and powder XRD techniques: An overview', *Inorganic Micro- and Nanomaterials: Synthesis and Characterization*, Eds. Dibenedetto Angela and Aresta Michele, De Gruyter, Berlin, Chapter 4, 57-91. ISBN: 978-3-110306-66-8 DOI:10.1515/9783110306873.57