

**PROF. DR.
PIERO MACCHI**
CURRICULUM VITAE
aggiornato il 05.09.2018



INFORMAZIONI PERSONALI

Nome, data di nascita, nazionalità

PIERO MACCHI, 01 Dicembre 1970, Nazionalità Italiana

ESPERIENZE LAVORATIVE

- Periodo
- Nome e indirizzo dell'azienda
- Posizione

- Periodo
- Nome e indirizzo dell'azienda
- Posizione

- Periodo
- Nome e indirizzo dell'azienda
- Posizione

- Periodo
- Nome e indirizzo dell'azienda
- Posizione

- Periodo
- Nome e indirizzo dell'azienda
- Posizione

- Periodo
- Nome e indirizzo dell'azienda
- Posizione

- Periodo
- Nome e indirizzo dell'azienda
- Posizione

- Periodo
- Nome e indirizzo dell'azienda
- Posizione

Settembre 2018 -

Politecnico di Milano, Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica, via Mancinelli 7 Milano
Professore Associato a tempo definito.

Gennaio 2009 -

Università di Berna, Dipartimento di Chimica e Biochimica, Freiestrasse 3, 3012 Berna, Svizzera
direttore del gruppo di ricerca in Cristallografia.

Da novembre 2009: Privatdozent; da aprile 2018: Professore Associato; da settembre 2018: 50% FTE

Luglio 2016

Università della Lorena (Vandoeuvre-lès-Nancy CEDEX, Francia)
Professore Invitato (contratto dell'Università della Lorena)

Settembre 2008

Università Tecnica di Bratislava (Repubblica Slovacca, su progetto EU)
Professore Invitato

Gennaio 2002 – dicembre 2008

Università di Milano, Dipartimento di Chimica Strutturale e stereochimica inorganica, via Venezian 21
20133, Milano (Italia)

Ricercatore confermato e professore aggregato

Novembre 1998-giugno 1999 e Marzo 2000 – Dicembre 2001

Università di Milano, Dipartimento di Chimica Strutturale e stereochimica inorganica, via Venezian 21
20133, Milano (Italia)

Funzionario tecnico VIII livello

Luglio 1999 – febbraio 2000

Università di Aarhus, Dipartimento di Chimica, Langelasgade 140 Aarhus C (Denmark)
Professore aggiunto (Adjunkt)

FORMAZIONE

1999
1994
1989

Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche (Università di Milano, Italia)

Laurea in Chimica (Università di Milano, Italia), (110/100 e lode)

Diploma di Maturità, Liceo Scientifico, Borgomanero (NO); (58/60)

LINGUE

Italiano (lingua madre), **Inglese** (molto fluente), **Tedesco** (Livello B2), **Francese** (scolastico)

PREMI E QUALIFICHE

1990-1992
2002
2009
2010
2010

Borse di studio da Istituto-Donegani - MONTEDISON (2) e ENICHEM (1)

Premio giovani ricercatori, Associazione italiana di cristallografia

Habilitation (*venia docendi*) in Chimica Cristallografica (Università di Berna, Svizzera)

Abilitazione a professore in Chimica Teorica, Analitica e Fisica (Sect. 31, Ministère de l'Enseignement
supérieur, de la Recherche et de l'Innovation, Francia)

Idoneità (legge 210/1998) a professore associato di Chimica Inorganica (CHIM03, Italia),

2013 Abilitazione a professore ordinario Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici (03/B1, Italia)
2017 Abilitazione a professore associato in Fondamenti Chimici delle tecnologie (03/B2, Italia)
2017 Abilitazione a professore ordinario in Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche (03/A2, Italia)
2018 Abilitazione a professore ordinario in Fondamenti Chimici delle tecnologie (03/B2, Italia)

RUOLI ISTITUZIONALI

Università di Milano

2004-2006 Rappresentante dei ricercatori nella giunta di area Chimica
2006-2008 Rappresentante dei ricercatori nella giunta di facoltà di scienze
2004-2008: Membro del consiglio dei docenti del dottorato di Scienze Chimiche

Università di Berna

2009-oggi: Supervisore dell'attività informatica del dipartimento
2015-2017: Membro del consiglio direttivo del Dipartimento di Chimica

RUOLI COMUNITÀ SCIENTIFICA

2001-oggi Associazione Italiana di Cristallografia: tesoriere (2009-2011); membro consiglio di presidenza (2012-2014)
2009-oggi Associazione Svizzera di Cristallografia: tesoriere e vice-presidente (2011-2015); presidente (2015-oggi)
2010, 2013 Chair della Gordon Research Conference "Electron distribution and chemical bonding"
2011-2014 Chair del gruppo "Charge spin and momentum density" dell'Associazione Europea di Cristallografia
2011-2015 Comitato di controllo della linea SNBL (ESRF, Francia) e del laboratorio sinQ (PSI, Svizzera)
2014-2017 Chair della commissione "charge, spin and momentum density" Unione Internazionale di cristallografia.

ATTIVITÀ DI RICERCA

Principal Investigator in 8 progetti di ricerca finanziati dal Fondo Nazionale Svizzero (2009-2018, per un totale di oltre 1'800'000 Franchi Svizzeri);
Principal investigator in 1 progetto della conferenza svizzera dei rettori universitari (2010-2011, 105'000 Franchi Svizzeri);
Project partner in un progetto del Paul Scherer Institute (Villigen, Svizzera, 2010-2013) e un progetto del fondo nazionale svizzero (2017-2020);
Project leader attribuito dal centro nazionale Svizzero di competenza per la ricerca sui materiali avanzati (MARVEL, 2018-oggi)
co-investigatore o project partner in 6 progetti MiuR (PRIN/FIRB) (2001-2008);

PUBBLICAZIONI

orcid.org/0000-0001-6292-9825
Scopus Author ID: 7003725053
Researcher ID: A-7562-2012
Oltre 3500 citazioni; H-index \geq 29
61 volte autore di riferimento; 29 volte primo autore; 8 volte autore unico

Oltre 120 articoli in riviste scientifiche internazionali o libri, tra cui: 1 Nature Communications; 9 J. Am. Chem. Soc.; 6 Angew. Chem.; 1 Phys. Rev. Lett.; 8 Chem. Comm.; 5 Chem. Eur. J.; oltre 10 articoli di review o capitoli di libri.
Curatore di un libro pubblicato (*Modern Charge Density Analysis*, pubblicato da Springer 2012) e una monografia in uscita (*Quantum Crystallography*, editore De Gruyter, pubblicazione prevista per il 2019).
Circa 60 comunicazioni a congresso.
Referee per le principali riviste (Nature, J. Am. Chem. Soc.; Angew. Chem.; Chem. Comm.; Chem. Science; Inorg. Chem.; J. Phys Chem.; Chemistry, IUCrJ) e per agenzie di finanziamento (tra cui ARN-Francia, MIUR-Italia, Accademia Polacca delle scienze, Accademia Russia delle scienze, Accademia delle scienze del Kazakhstan).
Co-editor di Acta Crystallographica Sect. B (IUCr) e Crystals (MDPI)

ATTIVITÀ DIDATTICA

Università di Århus

1 corso frontale

Università di Milano

2 corsi frontali
assistenza in 1 laboratorio

Università di Berna

5 corsi frontali
2 laboratori

Scuole e Workshops Internazionali

Bonding and Chemical Properties in Transition Metal Compounds (1999/2000; in inglese; 30 ore; corso di Laurea magistrale in Chimica)

Metodi di investigazione di materiali inorganici (dal 2002/2003 al 2007/2008; 6 CFU, 48 ore; corso di laurea magistrale in Chimica)

Strutturistica chimica (2002/2003, 6 CFU, 48 ore; corso di laurea in Biotecnologie del farmaco)

Strutturistica Chimica (2007/2008, 6 CFU, 48 ore, corso di laurea in Chimica, assegnato ma non attivato)

Assistenza al laboratorio di *chimica generale-stechiometria* (dal 2004/2005 al 2007/2008, 60 ore, corso di laurea in Chimica).

Coordinamento dei corsi di Cristallografia per il dottorato in Chimica (2004-2008, 14 ore/anno, in inglese)

Chemical Crystallography (dal 2009/2010 a oggi; in inglese, 3 CFU, 28 ore, corso di laurea magistrale in Chimica)

Laboratory of crystal structure determination (dal 2008/2009 a oggi, in inglese, 4CFU, 80 ore, corso di laurea magistrale in Chimica)

Symmetriehre (Simmetria Molecolare; titolare del corso dal 2008/2009, docente dal 2013/2014 a oggi; in tedesco, 3 CFU, 28 ore corso di laurea in Chimica)

Solid State Chemistry (dal 2013/2014 a oggi, 1,5 CFU, 14 ore; in inglese, corso di laurea magistrale in Chimica)

Quantenchemie 1 (Chimica Quantistica 1, in tedesco, dal 2016/2017 a oggi, 2 CFU, 21 ore, corso di laurea in Chimica e corso di laurea in Biochimica)

Praktikum Anorganische Chemie 2 (Laboratorio di Chimica Inorganica 2, inglese/tedesco, dal 2017/2018, 4 CFU, 80 ore, corso di laurea in Chimica)

Advanced Methods in X-ray diffraction analysis (2003 e 2007; organizzatore principale e docente)

Diffraction methods for structure determination in material science (2004, docente); *Scattering Techniques: from microscopic to atomic structures* (2009, docente); *Erice School on High Pressure Crystallography* (2009, docente); *IUCr Charge density school* (2011, docente), *APS charge density workshop* (2013, docente), *Zurich School of Crystallography* (2013, docente; scuola cui sono attribuiti 3 CFU); *Asian charge density workshop* (2015, docente); *Robert F. Stewart School on charge density* (2016, direttore e docente)
Direttore della scuola internazionale *Quantum Crystallography* (Erice, 2018)

SUPERVISIONE E VALUTAZIONE DI GIOVANI RICERCATORI

1999-OGGI	Relatore di oltre 10 tesi di Master e Bachelor, Relatore di 8 tesi di dottorato (Università di Milano e Università di Berna); relatore esterno di 3 tesi di dottorato.
2006-OGGI	Revisore di 11 tesi di dottorato (4 presso l'Università di Aarhus Danimarca; 2 presso l'Università di di Peryar e 1 presso l'Università Shiv Nadar, India; 1 presso l'Università Jagellonian, Cracovia, Polonia; 1 presso l'Università di Anversa, Belgio; 1 presso l'Università di Nancy, Francia; 1 presso l'Università di Augsburg, Germania) e di una tesi di abilitazione (presso l'Università di Augsburg, Germania).
2004-2007	Dr. Nikolina Janic (PhD, Università di Milano, Relatore della tesi di dottorato).
2007-2008; 2014-2015	Dr. Elena Marelli (Laurea Triennale, relatore tesi, Università di Milano; Laurea Magistrale, relatore esterno, Università di Milano; post-doc, Università di Berna; vincitrice del premio 2010 dell'associazione italiana di cristallografia per migliore tesi di laurea; attualmente post doc presso PSI, Svizzera)
2007-2010	Dr. Davide Tiana (supervisore della tesi di Laurea magistrale; supervisione della tesi di dottorato nel 2008, poi supervisione esterno; Università di Milano; attualmente Lecturer presso University college of Dublin, Irlanda)
2009-2013	Dr. Abita Shyorotra Chimpri (relatore della tesi di dottorato, Università di Berna, attualmente consulente presso Airbus)
2010-2011	Dr. Petra Simoncic (post-doc, Università di Berna, attualmente IP manager presso Heptagon)
2010-2012	Dr. Anna Krawzuck (post-doc, Università di Berna, attualmente ricercatrice presso l'Università Jagellonian, Cracovia, Polonia)
2011-2013	Dr. Shaun Evans (post doc, Università di Berna; attualmente journal manager presso <i>Frontiers Media</i>)
2012-2016	Dr. Leonardo Dos Santos (relatore della tesi di dottorato, Università di Berna; vincitore del premio tesi di dottorato della facoltà di scienze Università di Berna, attualmente professore assistente presso Università Minas Gerais, Brasile)
2013-2016	Dr. Arianna Lanza (relatore della tesi di dottorato, Università di Berna; vincitrice del premio Panalytical 2016 e del premio 2017 per tesi di dottorato dell'Associazione Italiana di cristallografia; attualmente post doc presso IIT-Pisa).
2013-2014	Dr. Maria Clara Ramahlo Freitas (supervisore esterno tesi di dottorato; attualmente post-doc presso Università Fluminense di Rio de Janeiro, Brasile).
2013-2015	Dr. Martin Fisch (post-doc, Università di Berna; attualmente ricercatore presso Istituto di Geologia, Università di Berna)
2015-OGGI	Mr. Fabio Montisci (dottorando)
2015- OGGI	Ms. Rebecca Scatena (dottoranda)
2016- OGGI	Ms. Michelle Ernst (dottoranda)
2016- OGGI	Mr. Tomasz Poreba (dottorando)
2016- 2018	Mr. Stefano Racioppi (dottorando dell'Università di Milano, in visita presso Università di Berna; attualmente dottorando presso l'Università di Milano)
2017-OGGI	Dr. Michal Andrzejewski (post-doc, Università di Berna)

Descrizione Dettagliata

Formazione: Il dott. Macchi ottiene la Laurea in Chimica nel 1994 (110/110 e lode) e il dottorato in scienze chimiche nel 1999 presso l'Università di Milano con relatore il professor Angelo Sironi.

Post Doc: Nel 1999-2000 è stato *adjunkt* presso l'Università di Aarhus (Danimarca), finanziata dalla fondazione DANSYNK per svolgere esperimenti accurati di diffrazione di raggi X presso laboratori di luce di sincrotrone (Brookhaven National Laboratory, USA) a basse temperature (fino a 10 K), sotto la guida del Dr. F. K. Larsen e del Prof. B.B. Iversen. Nel 2000, ha trascorso un breve periodo presso la State University of New York at Buffalo per una collaborazione con il prof. P. Coppens, che è stata ripetuta in anni successivi, per lo sviluppo del software XD (il più diffuso programma per l'affinamento di modelli di densità elettronica a partire da dati di diffrazione). Questo progetto è stato svolto in collaborazione con il prof. A. Volkov, il prof. T. Koritsanszky (Middle Tennessee State University) e il Dr. L. J. Farrugia (University of Glasgow).

Carriera Accademica:

Nel 2002, il dott. Macchi è divenuto ricercatore confermato (ed in seguito professore aggregato) presso la facoltà di Scienze dell'Università di Milano.

Nel 2009, si è trasferito presso il Dipartimento di Chimica e Biochimica dell'Università di Berna (Svizzera) dove è stato nominato *dozent II* (e poi *Dozent I*) e group leader del gruppo di ricerca in chimica cristallografica (macchi.dcb.unibe.ch). Ha ottenuto la *venia docendi* in *Chemical Crystallography* dalla facoltà di scienza dell'Università di Berna (2009), presentando una tesi di *Habilitation* dal titolo "Structural investigations on soft bonds". In seguito, è stato nominato *privatdozent* (PD), con svolgimento della prova di didattica, e infine professore associato.

Nel 2010, ha ottenuto la qualificazione a professore in Chimica Teorica, Analitica e Fisica, da parte del ministero francese della ricerca (31^a sezione) e l'idoneità a professore associato (Legge 210/1998) di chimica inorganica (CHIM03) con svolgimento della prova di didattica. Nell'ottobre 2012, è stato selezionato per una posizione di professore associate di chimica inorganica presso l'Università La Sapienza di Roma, ma ha rinunciato.

Nel 2013, ha ottenuto l'abilitazione a professore di prima e seconda fascia nel settore 03/B1 e nel 2017 ha ottenuto l'abilitazione a professore di prima fascia nel settore 03/A2 e a professore di seconda fascia nel settore 03/B2. Nel 2018 ha ottenuto l'abilitazione a professore di I fascia del settore 03/B2.

Nel 2018 è divenuto professore associato presso il dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica del Politecnico di Milano, dove lavora in regime di tempo definito.

Principali risultati scientifici

Leadership nel campo della cristallografia quantistica.

Il dott. Macchi è entrato in questo campo all'inizio del suo dottorato di ricerca (1996), quando un'importante innovazione è avvenuta nell'ambito della diffrazione di raggi X, cioè l'avvento di nuovi detector bidimensionali capaci di raccogliere molto più accuratamente le intensità X. Il principale obiettivo era quello di poter impiegare questi nuovi strumenti non solo per determinazioni standard di strutture molecolari o polimeriche in cristalli organici/organometallici o inorganici, ma anche per studi più accurati come quelli di determinazione della densità elettronica, mediante modelli multipolari. Questo progetto ebbe notevole successo e i lavori svolti nel periodo del dottorato hanno trovato pubblicazione su riviste di elevato impatto (3 nel *Journal of the American Chemical Society*).¹ Questi studi riguardavano analisi di densità elettronica in complessi di metalli di transizione o in piccoli cluster metallo-carbonilici. Questo portò poi ad un articolo rivisitato che è ampiamente citato.² L'approccio combinava analisi topologica della densità elettronica (all'interno della teoria quantistica degli atomi nelle molecole) e modelli tradizionali basati su orbitali molecolari o orbitali ibridi di valenza.³

Grazie a questi lavori (anche successivi al dottorato) il dott. Macchi è divenuto un co-autore del programma XD, il software maggiormente impiegato per la determinazione sperimentale di densità elettronica, uscito in diverse versioni (XD2003, XD2006; XD2016).⁴

¹ a) Macchi, P.; Proserpio, D. M.; Sironi, A. *J. Am. Chem. Soc.*, **1998**, *120*, 1447; b) Macchi, P.; Proserpio, D. M.; Sironi, A. *J. Am. Chem. Soc.*, **1998**, *120*, 13429; c) Macchi, P.; Garlaschelli, L.; Martinengo, S.; Sironi, A. *J. Am. Chem. Soc.*, **1999**, *121*, 10428.

² Macchi, P.; Sironi, A. *Coord. Chem. Rev.*, **2003**, *238-239*, 383.

³ a) Macchi, P.; Schultz, A. J.; Larsen, F. K.; Iversen, B. B. *J. Phys. Chem. A* **2001**, *105*, 9231; b) Macchi, P.; Garlaschelli, L.; Sironi, A., *J. Am. Chem. Soc.*, **2002**, *124*, 14173; c) Macchi, P.; Donghi, D.; Sironi, A. *J. Am. Chem. Soc.*, **2005**, *127*, 16494; d) Macchi, P.; Sironi, A. in *The Quantum Theory of Atoms in Molecules From Solid State to DNA and Drug Design*, editors Matta, C. F. and Boyd, R. J, Wiley-VCH, Weinheim **2007**.

⁴ Volkov, A.; Macchi, P.; Farrugia, L. J.; Gatti, C.; Mallinson, P.; Richter, T.; Koritsanszky, T. *XD - A Computer Program Package for Multipole Refinement, Topological Analysis of Charge Densities and Evaluation of Intermolecular Energies from Experimental and Theoretical Structure Factors*.

Dopo aver creato un nuovo gruppo di ricerca presso l'Università di Berna, ha iniziato ad investigare la correlazione tra distribuzione di densità elettronica e le proprietà opto-elettroniche, dielettriche e magnetiche, in cristalli organici e polimeri organometallici.⁵

In questo ambito, il gruppo Macchi ha sviluppato un innovativo software per il calcolo delle polarizzabilità atomiche a partire da una partizione della densità elettronica di una molecola e a partire da questo, la possibilità di prevedere la costante dielettrica e gli indici di rifrazione di un materiale. Inoltre ha studiato teoricamente come le aggregazioni di gruppi cromofori in cristalli possano influenzare la formazione di proprietà ottiche non-lineari, in particolare la generazione di seconda armonica.

Il lavoro del dott. Macchi in questo campo di ricerca è stato riconosciuto dalla elezione a "Chair" della prestigiosa Gordon Research Conference in *Electron Distribution and Chemical Bonding* (con meeting organizzati nel 2010 e 2013), a "Chair" dello "Special Interest Group" in "Charge, spin and momentum density" della associazione europea di cristallografia (2011-2014) e della analoga commissione dell'Unione Internazionale di Cristallografia (2014-2017).

IL Dott. Macchi ha organizzato numerosi meeting e scuole a livello internazionale, tra cui: European Charge Density Meeting (2008), 2 edizioni del workshop "Advance methods in X-ray diffraction analysis" (2003, 2007), due edizioni della Gordon Conference su "Electron Distribution and Chemical Bonding", un meeting annuale dell'associazione Svizzera di Cristallografia (2011), l'edizione inaugurale della "Robert F. Stewart School on Charge density" (2016). Insieme al dott. C. Gatti, è stato curatore di un libro a contributo multiple (*Modern Charge Density Analysis*, Springer 2012).

Nel 2011, insieme al Prof. D. Jayatilaka, ha proposto e ottenuto l'organizzazione della prima scuola internazionale di Erice sul tema "Quantum Crystallography", che si svolgerà a Erice nel giugno 2018.

Cristallografia ad alta pressione

A metà degli anni 2000, il dott. Macchi ha iniziato anche un secondo ambito di ricerca, quello della cristallografia ad alta pressione.

La motivazione principale è lo studio delle forze che regolano le strutture di molecole e la loro aggregazione. Infatti attraverso la compressione si possono da un lato testare le forze tra atomi e molecole e dall'altro modificare gli stati elettronici delle molecole e quindi il loro legame. Questo approccio ha consentito una serie di osservazioni molto interessanti, tra cui: la reazione di trasferimento protonico in cristalli di acidi carbossilici,⁶ la modifica delle iper-polarizzabilità di molecole organiche e conseguentemente della loro attività ottica non-lineare,⁷ il fenomeno di "orbital re-ordering" in network organometallici,⁸ la reazione di addizione nucleofila in framework organometallici porosi,⁹ l'attivazione del legame C-H in complessi caratterizzati da interazioni agostiche,¹⁰ la perturbazione dell'aromaticità in sistemi annulenicici¹¹ la polimerizzazione dell'acido ossalico ad alta pressione.¹²

In una recente pubblicazione, i campi di determinazione di densità elettronica e di alta pressione si sono incontrati, poiché per la prima volta è stato possibile determinare con accuratezza la distribuzione di densità elettronica in un cristallo molecolare posto ad elevata.¹¹

Queste ricerche hanno consentito al dott. Macchi di iniziare speciali cooperazioni con la Swiss Light Source (presso l'istituto Paul Scherrer, di Villigen, Svizzera) per lo sviluppo di una stazione per lo studio di proprietà dielettriche, ottiche e magnetiche sotto pressione e la loro correlazione con la misura accurata di densità elettronica.

⁵ a) Chimpri, A. S.; Gryl, M.; Dos Santos, L. H. R.; Krawczuk, A.; Macchi, P. *Crystal Growth & Design*, **2013**, *13*, 2995; b) Dos Santos, L.; Lanza, A.; Barton, A.; Brambleby, J.; Blackmore, W.; Goddard, P.; Xiao, F.; Williams, R.; Lancaster, T.; Pratt, F.; Blundell, S.; Singleton, J.; Manson, J.; Macchi, P. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 2280; c) Dos Santos, L. H. R.; Macchi, P. *Crystals*, **2016**, *6*, 43; d) Ernst M.; Dos Santos, L. H. R.; Macchi, P. *CrystEngComm* **2016**, *18*, 7339; f) Dos Santos, L. H. R.; Krawczuk, A.; Macchi, P. *J. Phys. Chem. A* **2015**, *119*, 3285.

⁶ a) Casati, N.; Macchi, P.; Sironi, A. *Chem. Commun.*, **2009**, 2679; b) Macchi, P.; Casati, N.; Marshall, W. G.; Sironi, A. *CrystEngComm*. **2010**, *12*, 2596.

⁷ Marelli, E.; Casati, N.; Gozzo, F.; Macchi, P.; Simoncic, P.; Sironi, A. *CrystEngComm*, **2011**, *13*, 6845.

⁸ Lanza, A.; Fiolka, C.; Fisch, M.; Casati, N.; Skoulatos, M.; Rüegg, C.; Krämer, K. Macchi, P. *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 14504.

⁹ Lanza, A.; Germann, L. S.; Fisch, M.; Casati, N.; Macchi, P. *J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, *137*, 13072.

¹⁰ Scherer, W.; Dunbar, A. C.; Barquera-Lozada, J. E.; Schmitz, D.; Eickerling, G.; Kratzert, D.; Stalke, D.; Lanza, A.; Macchi, P.; Casati, N.; Ebad-Allah, J.; Kuntscher, C. *Angew. Chem.* **2015**, *54*, 2505.

¹¹ Casati, N.; Kleppe, A.; Jephcoat, A.; Macchi, P. *Nature Comm.* **2016**, *7*, 10901.

¹² Casati, N.; Jephcoat, A.; Wilhelm, H.; Macchi, P. *Acta Cryst.* **2014**, *A70*, C898 e *articolo in preparazione*.

ELENCO DELLE PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE (AGGIORNATO AL 15.04.2018)

Articoli con " Macchi(*) " indicano che il dott. Macchi è corresponding author

Articoli in via di pubblicazione sono riportati con il DOI

ARTICOLI SU RIVISTA

Dittrich, B.; Fabbiani, F. P. A.; Henn, J.; Schmidt, M. U.; Macchi, P.; Meindl, K.; Spackman, M. A. *Acta Cryst.*, **2018**, B74 in the press.
Azulene revisited: solid-state structure, invariom modeling and lattice-energy minimization of a classical example of disorder

Wehinger, B.; Fiolka, C.; Lanza, A.; Scatena, R.; Kubus, M.; Grockowiak, A.; Coniglio, W. A.; Graf, D.; Skoulatos, M.; Chen, J. -H.; Gukelberger, J.; Casati, N.; Zaharko, O.; Macchi, P.; Krämer, K. W.; Tozer, S.; Mudry, C.; Normand, B.; Rüegg, C. *Phys. Rev. Lett.*, **2018**, 121, 117201.

Giant pressure dependence and dimensionality switching in a metal-organic quantum antiferromagnet

Bürgi, H. B.; Macchi, P. (*) *IUCrJ*, **2018**, 5, 654-657.

Comments on 'Hydrogen bonds in crystalline D-alanine: diffraction and spectroscopic evidence for differences between enantiomers'

Vigano, M.; Ferretti, F.; Ragaini, F.; Macchi, P. *Inorg. Chim. Acta*, **2018**, 483, 305-309.

A Chiral Ligand Accessible in One Step: Synthesis of bis-((R)-(+)-Bornyl)acenaphthenequinonediimine and of its Zinc and Nickel Complexes.

Genoni, A.; Bucinsky, L.; Clauser, N.; Contreras-Garcia, J.; Dittrich, B.; Dominiak, P. M.; Espinosa, E.; Gatti, C.; Giannozzi, P.; Gillet, J.-M.; Jayatilaka, D.; Macchi, P.; Madsen, A. Ø.; Massa, L. J.; Matta, C. F.; Merz, K. M.; Nakashima, P. N. H.; Ott, H.; Ryde, U.; Schwarz, K.; Sierka, M.; Grabowsky, S. *Chemistry, Eur. J.*, **2018**, 24, 10881-10905.

Quantum Crystallography: Current Developments and Future Perspectives

Racioppi, S.; Della Pergola, R.; Colombo, V.; Sironi, A.; Macchi, P. (*) *J. Phys. Chem. A*, **2018**, 122, 5004-5015.

Electron Density Analysis of Metal Clusters with Semi-Interstitial Main Group Atoms. Chemical Bonding in [Co₆X(CO)₁₆] Species

Kubus, M.; Lanza, A.; Scatena, R.; Dos Santos, L.; Wehinger, B.; Casati, N.; Fiolka, C.; Keller, L.; Macchi, P. (*) Rüegg, C.; Krämer, K. *Inorg. Chem.*, **2018**, 57, 4934-4943.

Quasi-2D Heisenberg antiferromagnets [CuX(py₂)₂](BF₄) with X = Cl and Br

Macchi, P. (*) Ragaini, F.; Casati, N.; Krawczuk, A.; Sironi, A.; *J. Comput. Chem.* **2018**, 39, 581-586.

Experimental and theoretical electron density of intermediates in Palladium-Phenanthroline Catalyzed Carbonylation of Amines and Reductive Carbonylation of Nitroarenes

Fugel, M.; Jayatilaka, D.; Hupf, E.; Overgaard, J.; Hathwar, V. H.; Macchi, P.; Turner, M. J.; Howard, J. A. K.; Dolomanov, O.; Puschmann, H.; Iversen, B.B.; Bürgi, H.B.; Grabowsky, S. *IUCrJ*, **2018**, 5, 32-44.

Probing accuracy and precision of Hirshfeld Atom Refinement with HART interfaced to Olex2

Ferretti, F.; Rimoldi, M.; Ragaini, F.; Macchi, P. *Inorg. Chim. Acta*, **2018**, 470, 284-289.

Reaction of arylhydroxylamines with [Pd(Neoc)(NO₃)₂] (Neoc = neocuproine). Non-innocent behavior of the nitrate anion

Meixner, P.; Batke, K.; Fischer, A.; Schmitz, D.; Eickerling, G.; Kalter, M.; Ruhland, K.; Eichele, K.; Barquera-Lozada, E.; Casati, N. P. M.; Montisci, F.; Macchi, P.; Scherer, W. *J. Phys. Chem. A*, **2017**, 121, 7219-7235.

J(Si,H) Coupling Constants of Activated Si-H Bonds

Della Pergola, R.; Sironi, A.; Colombo, V.; Garlaschelli, L.; Racioppi, S.; Sironi, A.; Macchi, P. (*) *J. Organomet. Chem.* **2017**, 849-850, 130-136.

Periodical trends in [Co₆E(CO)₁₆]- clusters: structural, synthetic and energy changes produced by substitution of P with As.

Macchi, P. (*) *Acta Crystallographica* **2017**, B73, 330-336.

The future of topological analysis in experimental charge-density research

Casati, N.; Genoni, A.; Meyer, B.; Krawczuk, A.; Macchi, P. (*) *Acta Crystallographica* **2017**, B73, 584-597.

Exploring charge density analysis in crystals at high pressure. Data collection, data analysis and advanced modelling

Genoni, A.; Dos Santos, L.; Meyer, B.; Macchi, P. (*) *IUCrJ* **2017**, 4, 136-146.

Can X-ray constrained Hartree-Fock wavefunctions retrieve electron correlation?

Brambleby, J.; Manson, J. L.; Goddard, P. A.; Stone, M. B.; Johnson, R. D.; Manuel, P.; Villa, J. A.; Brown, C. M.; Lu, H.; Chikara, S.; Zapf, V.; Lapidus, S. H.; Scatena, R.; Macchi, P.; Chen, Y.-S.; Wu, L.-C.; Singleton, J. *Phys. Rev. B.*, **2017**, 95, 134435

Combining microscopic and macroscopic probes to untangle the single-ion anisotropy and exchange energies in an S=1 quantum antiferromagnet

Dos Santos, L.; Lanza, A.; Barton, A.; Brambleby, J.; Blackmore, W.; Goddard, P.; Xiao, F.; Williams, R.; Lancaster, T.; Pratt, F.; Blundell, S.; Singleton, J.; Manson, J.; Macchi, P. (*) *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, 138, 2280-2291.

Experimental and Theoretical Electron Density Analysis of Copper Pyrazine Nitrate Quasi-Low-Dimensional Quantum Magnets

Casati, N.; Kleppe, A.; Jephcoat, A.; Macchi, P.(*) *Nature Comm.* **2016**, *7*, 10901.

Putting pressure on aromaticity along with in situ experimental electron density of a molecular crystal

Dos Santos, L. H. R.; Macchi, P.(*) *Crystals*, **2016**, *6*, 43.

The Role of Hydrogen Bond in Designing Molecular Optical Materials

Zardi, P.; Intrieri, D.; Carminati, D. M.; Ferretti, F.; Macchi, P.; Gallo, E. *J. of Porphyrins and Phthalocyanines*. **2016**, *20*, 1156.

Synthesis and Catalytic Activity of m-Oxo Ruthenium (IV) Porphyrin Species to Promote Amination Reactions

Ersnt M.; Dos Santos, L. H. R.; Macchi, P.(*) *CrystEngComm* **2016**, *18*, 7339-7346.

Optical properties of metal organic networks from distributed atomic polarizabilities

Scherer, W.; Dunbar, A. C.; Barquera-Lozada, J. E.; Schmitz, D.; Eickerling, G.; Kratzert, D.; Stalke, D.; Lanza, A.; Macchi, P.(*); Casati, N.; Ebad-Allah, J.; Kuntscher, C. *Angew. Chem.* **2015**, *54*, 2505–2509

Anagostic Interactions under Pressure: Attractive or Repulsive?

Ayers, P. W.; Boyd, R. J.; Bultinck, P.; Caffarel, M.; Carbo-Dorca, R.; Causa, M.; Cioslowski, J.; Contreras-Garcia, J.; Cooper, D. L.; Coppens, P.; Gatti, C.; Grabowski, S.; Lazzeretti, P.; Macchi, P.; Martin Pendas, A.; Popelier, P. L. A.; Ruedenberg, K.; Rzepa, H.; Savin, A.; Sax, A.; Schwarz, W. H. E.; Shahbazian, S.; Silvi, B.; Sola, M.; Tsirelson, V. *Comput. Theo. Chem.* **2015**, *1053*, 2-16

Six Questions on Topology in Theoretical Chemistry

Macchi, P.(*); Krawczuk, A. *Comput. Theo. Chem.* **2015**, *1053*, 165-172

The Polarizability of Organometallic bonds

Tiana, D.; Francisco, E.; Macchi, P.; Sironi, A.; Martín Pendás, A. *J. Phys. Chem. A* **2015**, *119*, 2153–2160

An Interacting Quantum Atoms analysis of the Metal-Metal Bond in M₂(CO)₈ Systems

Dos Santos, L. H. R.; Krawczuk, A.; Macchi, P.(*) *J. Phys. Chem. A* **2015**, *119*, 3285–3298

Distributed Atomic Polarizabilities of Amino Acids and their Hydrogen-Bonded Aggregates

Aleman, P.; Canadell, E.; Geng, Y.; Hauser, J.; Macchi, P.; Krämer, K.; Decurtins, S.; Liu S-X. *ChemPhysChem* **2015**, *16*, 1361-1365

Exploring the Electronic Structure of an Organic Semiconductor Based on a Compactly Fused Electron Donor-Acceptor Molecule

Macchi, P.(*); Gillet, J.-M.; Taulelle, F.; Campo, J.; Claiser, N.; Lecomte, C. *IUCrJ*, **2015**, *2*, 441-451

Modelling the experimental electron density: only the synergy of various approaches can tackle the new challenges

Fisch, M.; Lanza, A.; Boldyreva, E.; Macchi, P.(*); Casati, N. *J. Phys. Chem. C*, **2015**, *119*, 18611–18617

Kinetic Control of High-Pressure Solid-State Phase Transitions: A Case Study on L-Serine

Lanza, A.; Germann, L. S.; Fisch, M.; Casati, N.; Macchi, P. (*) *J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, *137*, 13072–13078

Solid-state reversible nucleophilic addition in a highly flexible MOF

Pedrazzini, T.; Pirovano, P.; Dall'Acqua, M.; Ragaini, F.; Illiano, P.; Macchi, P.; Abbiati, G.; Caselli, A. *Eur. J. Inorg Chem.* **2015** 5089-5098

Organometallic Reactivity of [Silver(I)(Pyridine-Containing Ligand)] Complexes Relevant to Catalysis

Fisch, M.; Lanza, A.; Macchi, P.; Casati, N. *J. Appl. Cryst.* **2015**, *48*, 1956-1963

The benefits of one-dimensional detectors for high-pressure powder X-ray diffraction

Macchi, P.(*) *Chimia* **2014**, *68*, 31-37

Crystallographic approaches for the investigation of molecular materials: structure property relationships and reverse crystal engineering.

Zardi, P.; Caselli, A.; Macchi, P.; Ferretti, F.; Gallo, E. *Organometallics* **2014**, *33*, 2210–2218

Synthesis of Biologically Relevant Compounds by Ruthenium Porphyrin Catalyzed Amination of Benzylic C–H Bonds

Krawczuk, A.; Pérez, D.; Macchi, P.(*) *J. Appl. Cryst.*, **2014**, *47*, 1452–1458

PolaBer: a program to calculate and visualize distributed atomic polarizabilities based on electron density partitioning

Macchi, P.(*); Casati, N.; Evans, S. R.; Gozzo, F.; Simoncic, P.; Tiana, D. *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 12824 - 12827

"Off-axis" metal-metal bond in Mn₂(CO)₁₀ at high pressure

Viganò, M.; Ferretti, F.; Caselli, A.; Ragaini, F.; Rossi, M.; Mussini, P.; Macchi, P. *Chemistry, Eur. J.* **2014**, *20*, 14451–14464

Easy Entry into Reduced Ar-BIANH₂ compounds. A New Class of Quinone/Hydroquinone-Type Redox Active Couples with an Easily Tunable Potential

Lanza, A.; Fiolka, C.; Fisch, M.; Casati, N.; Skoulatos, M.; Rüegg, C.; Krämer, K. Macchi, P.(*) *Chem. Comm.* **2014**, *50*, 14504-14507

New Magnetic Frameworks of [(CuF₂(H₂O)₂)_x(pyz)]

Dos Santos, L.; Genoni, A.; Macchi, P. *Acta Cryst. Sec. A* **2014**, *A70*, 532-551

Unconstrained and X-ray constrained Extremely Localized Molecular Orbitals: analysis of the reconstructed electron density

Calahorra, A. J.; Macchi, P. (*); Salinas-Castillo, A.; San Sebastián, E.; Seco, J. M.; Rodríguez-Diéguez, A. *CrystEngComm* **2014**, *16*, 10492-10496

Photoluminescence of the First Examples of Metal-Organic-Frameworks with Two Novel Tetrazolatephenyl Acetic Acid Derivatives. An Experimental and Theoretical Study.

Krawczuk, A.; Macchi, P. (*) *Chemistry Central Journal* **2014**, *8*, 68

Charge density analysis for crystal engineering

Castano, B.; Guidone, S.; Gallo, E.; Ragaini, F.; Casati, N.; Macchi, P.; Sisti, M.; Caselli, A. *Dalton Trans.*, **2013**, *42*, 2451-2462

Asymmetric cyclopropanation of olefins catalysed by Cu(I) complexes of chiral pyridine-containing macrocyclic ligands (Pc-L*)

Macchi, P.; Jing, W.; Guidetti-Grept, R.; Keese, R. *Tetrahedron*, **2013**, *69*, 2479-2483

The Structure of some [4.5.5]Fenestranes

Cerioti, A.; Macchi, P. (*); Sironi, A.; El Afefey, S.; Daghetta, M.; Fedi, S.; Fabrizi, F.; Della Pergola, R. *Inorg Chem.*, **2013**, *52*, 1960-1964

Cooperative effects of electron donors and acceptors for the stabilization of elusive metal cluster frameworks: synthesis and solid state structures of [Pt₁₉(CO)₂₄(μ₄-AuPPh₃)₃]⁻ and [Pt₁₉(CO)₂₄(μ₄-Au₂(PPh₃)₂)₂].

Keese, R.; Berdat, F.; Macchi, F. *J. Org. Chem.*, **2013**, *78*, 1965-1970

Stereoselectivity of additions to N-methyl acetonitrilium fluorosulfonate

Chimpri, A. S.; Macchi, P. (*) *Physica Scripta* **2013**, *87*, 048105

Electron Density Building Block approach for metal organic frameworks

Macchi, P. (*) *Cryst. Rev.* **2013**, *19*, 58-109

Modern charge density studies: the entanglement of experiment and theory

Chimpri, A. S.; Gryl, M.; Dos Santos, L. H. R.; Krawczuk, A.; Macchi, P. (*) *Crystal Growth & Design*, **2013**, *13*, 2995-3010

Correlation between Accurate Electron Density and Linear Optical Properties in Amino Acid Derivatives: L-Histidinium Hydrogen Oxalate

Intrieri, D.; Caselli, A.; Ragaini, F.; Macchi, P.; Casati, N.; Gallo, E. *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2012**, 569-580

Insights into the Mechanism of the Ruthenium Porphyrin-Catalysed Allylic Amination of Olefins by Aryl Azides

Rimoldi, M.; Ragaini, F.; Gallo, E.; Ferretti, F.; Macchi, P.; Casati, N., *Dalton Trans.*, **2012**, *41*, 3648-3658.

Unexpected Isomerism in "[Pd(2,9-dimethylphenanthroline)X₂]" (X = Cl, Br, I) Complexes: a Neutral and an Ionic Forms Exist

Cherchi, L.; Fumagalli, A.; Fedi, S.; Zanello, P.; Fabrizi De Biani, F.; Laschi, F.; Garlaschelli, L.; Macchi, P.; Sironi, A., *Inorg. Chem.*, **2012**, *51*, 9171-9180.

Synthesis, reactivity, electrochemical behaviour and crystal structure of a family of multivalent metal carbido-carbonyl clusters based on the Rh₁₀(C)₂Au₄₋₆ framework

Tiana, D.; Francisco, E.; Blanco, M. A.; Macchi, P.; Sironi, A.; Martín Pendas, A. *Phys Chem Chem Phys* **2011**, *13*, 5068-5077

Restoring orbital thinking from real space descriptions: Bonding in classical and non-classical transition metal carbonyls

Ragaini, F.; Larici, H.; Rimoldi, M.; Caselli, A.; Ferretti, F.; Macchi, P.; Casati, N. *Organometallics*, **2011**, *30*, 2385-2393

Mapping Palladium Reduction by Carbon Monoxide in a Catalytically Relevant System. A Novel Palladium(I) Dimer

Bruni, G.; Gozzo, F.; Capsoni, D.; Bini, M.; Macchi, P.; Simoncic, P.; Berbenni, V.; Milanese, C.; Girella, A.; Ferrari, S.; Marini, A. *J. Pharm. Science.*, **2011**, *100*, 2321-2332

Thermal, Spectroscopic And Ab-Initio Structural Characterization Of Carprofen Polymorphs

Bennett, T. D.; Simoncic, P.; Moggach, S. A.; Gozzo, F.; Macchi, P.; Keen, D. A.; Tan, J. C.; Cheetham, A. K. *Chem. Comm.* **2011**, 7983-7985

Reversible Pressure-Induced Amorphization of a Zeolitic Imidazolate Framework (ZIF-4)

Macchi, P. (*); Bürgi, H. B.; Chimpri, A. S.; Hauser, J.; Gal, Z. *J. Appl. Cryst.*, **2011**, *44*, 763-771

Low energy contamination of Mo micro-source X-ray radiation: analysis and solution of the problem

Marelli, E.; Casati, N.; Gozzo, F.; Macchi, P. (*); Simoncic, P.; Sironi, A. *CrystEngComm*, **2011**, *13*, 6845-6849

High pressure modification of organic NLO materials: large conformational re-arrangement of 4-aminobenzophenone.

Macchi, P. (*) *J. Superhard Materials*, **2011**, *33*, 23-32

On the nature of chemical bonding in γ-boron

Krawczuk-Pantula A., Pérez D., Stadnicka K., Macchi P. (*) *Trans. Amer. Cryst. Ass.* **2011**, 1-25

Distributed atomic polarizabilities from electron density. 1. Motivations and Theory

Peli, G.; Daghetta, M.; Macchi, P. (*); Sironi, A.; Garlaschelli, L. *Dalton Trans.*, **2010**, 39, 1188-1190.

Four tetrairidium carbonyl clusters linked by six diphosphino ligands: synthesis and X-ray structure of [Ir₄(CO)₉]₄(dppmb)₆ (dppmb = 1,4-bis(diphenylphosphinomethyl)benzene)

Tiana, D.; Francisco, E.; Blanco, M.; Macchi, P.; Sironi, A.; Martín Pendas, A. *J. Chem. Theory Comput.*, **2010**, *6*, 1064-1074

Bonding in classical and non-classical transition metal carbonyls: the interacting quantum atoms perspective

- Hagar, M.; Ragaini, F.; Monticelli, E.; Caselli, A.; Macchi, P.; Casati, N. *Chem. Comm.* **2010**, *46*, 6153-6155
Chiral Cyclopropylamines in the Synthesis of New Ligands; First Asymmetric Alkyl-BIAN Compounds
- Nunzi, F.; Fantacci, S.; Cariati, E.; Tordin, E.; Casati, N.; Macchi, P. (*) *J. Mater. Chem.* **2010**, *20*, 7652-7660
Stabilization through p-dimethylaminobenzaldehyde of a new NLO-active phase of [E-4-(4-dimethylaminostyryl)-1-methylpyridinium]iodide: Synthesis, structural characterization and theoretical investigation of its electronic properties
- Macchi, P. (*); Casati, N.; Marshall, W. G.; Sironi, A. *CrystEngComm*. **2010**, *12*, 2596-2603
 α and β forms of oxalic acid di-hydrate at high pressure: a theoretical simulation and a neutron diffraction study
- Cariati, E.; Ugo, R.; Santoro, G.; Tordin, E.; Sorace, L.; Caneschi, A.; Sironi, A.; Macchi, P.; Casati, N. *Inorg. Chem.*, **2010**, *49*, 10894-10901
Slow Relaxation of the Magnetization in Non-Linear Optical Active Layered Mixed Metal Oxalate Chains
- Macchi, P. (*) *Chimia*, **2009**, *63*, 29-34
Electron Density distribution in Organometallic materials.
- Casati, N.; Macchi, P. (*); Sironi, A. *Chemistry, Eur. J.*, **2009**, *15*, 4446-4457.
Molecular Crystals Under High Pressure: Theoretical and Experimental Investigations of the Solid-Solid Phase Transitions in $\text{Co}_2(\text{CO})_6(\text{XPh}_3)_2$ (X=P, As)
- Dragonetti, C.; Carlucci, L.; D'Alfonso, G.; Lucenti, E.; Macchi, P.; Roberto, D. Sironi, A.; Ugo, R. *Organometallics.*, **2009**, *28*, 2668-2676.
Synthesis, Spectroscopic and X-ray Characterization of Rhenium Carbonyl Complexes with Different Silsesquioxanes, as Models that Mimic the Chemical Behaviour and the Topology of the Silica Surface
- Casati, N.; Macchi, P. (*); Sironi, A. *Chem. Commun.*, **2009**, 2679-2681.
Hydrogen migration in oxalic acid di-hydrate at high pressure?
- Acetti, D.; D'Arrigo, P.; Giordano, C.; Macchi, P.; Servia, S.; Tessaro, D. *int. J. Art. Organs*, **2009**, *32*, 204-212.
New aliphatic glycerophosphoryl-containing polyurethanes: synthesis, platelet adhesion and cytotoxicity studies
- Fantauzzi, S.; Gallo, E.; Caselli, A.; Ragaini, F.; Casati, N.; Macchi, P.; Cenini, S. *Chem. Comm.* **2009**, 3952-3954.
The Key-Intermediate in the Aminations of Saturated C-H Bonds: Synthesis, X-ray Characterization and Catalytic Activity of $\text{Ru}(\text{TPP})(\text{NAr})_2$ (Ar = 3,5-(CF₃)₂C₆H₅)
- Macchi, P. (*) *Angew. Chem. Int. Engl. Ed.*, **2009**, *48*, 5793-5795
Resonant structures and electron density analysis
- Ragaini, F.; Gasperini, M.; Cenini, S.; Arnera, L.; Caselli, A.; Macchi, P.; Casati, N. *Chemistry, Eur. J.*, **2009**, *15*, 8064-8077.
Mechanistic Study of the Palladium-Phenanthroline Catalyzed Carbonylation of Nitroarenes and Amines: Palladium-Carbonyl
- Farrugia, L. J.; Macchi, P. (*) *J. Phys. Chem. A.*, **2009**, *113*, 10058-10067
On the interpretation of the source function
- Janjic, N.; Peli, G.; Garlaschelli, L.; Sironi, A.; Macchi, P. (*) *Crystal Growth and Design* **2008**, *8*, 854-862.
Synthesis and solid state behavior of host-guest carbonyl Rh(I) polymers assembled through bidentate phosphine ligands
- Nunzi, F.; Fantacci, S.; De Angelis, F.; Sgamellotti, A.; Cariati, E.; Ugo, R.; Macchi, P. *J. Phys. Chem. C* **2008**, *112*, 1213-1226
Theoretical Investigations of the Effects of J-Aggregation on the Linear and Nonlinear Optical Properties of E-4-(4-Dimethylaminostyryl)-1-methylpyridinium [DAMS⁺]
- Cariati E.; Macchi, R.; Tordin, E.; Ugo, R.; Bogani, L.; Caneschi, A.; Macchi, P. (*); Casati, N.; Sironi, A. *Inorg. Chim. Acta. Inorg. Chim. Acta*, **2008**, 4004-4011
Tuning the magnetic properties of a new family of hybrid mixed metal 3 oxalates having 1D magnetic chains and layers of J aggregates of [DAMS⁺] 4 producing superior SHG
- Bazzini, C.; Caronna, T.; Fontana, F.; Macchi, P. (*); Mele, A.; Natali Sora, I.; Panzeri, W.; Sironi, A. *New J. Chem.*, **2008**, *32*, 1710-1717
Synthesis, Crystal Structure and Crystal Packing of Diaza[5]Helicenes
- Caselli, A.; Cesana, F.; Gallo, E.; Casati, N.; Macchi, P.; Sisti, M.; Celentano, G.; Cenini, S. *Dalton Trans.*, **2008**, *32*, 4202-4205.
Designing new ligands: asymmetric cyclopropanation by Cu(I) complexes based on functionalised pyridine-containing macrocyclic ligands
- Costa, M.; Della Pergola, R.; Fumagalli, A.; Laschi, F.; Losi, S.; Macchi, P.; Sironi, A.; Zanello, P. *Inorg. Chem.*, **2007**, *46*, 552-560.
Mixed Co-Rh Nitrido-Encapsulated Carbonyl Clusters. Synthesis, Solid-State Structure, and Electrochemical/EPR Characterization of the Anions $[\text{Co}_{10}\text{Rh}(\text{N})_2(\text{CO})_{21}]^{3-}$, $[\text{Co}_{10}\text{Rh}_2(\text{N})_2(\text{CO})_{24}]^{2-}$, and $[\text{Co}_{11}\text{Rh}(\text{N})_2(\text{CO})_{24}]^{2-}$.
- Casati, N.; Macchi, P.; Sironi, A. *J. Appl. Crystallogr.*, **2007**, *40*, 628-630.
Improving the quality of diamond anvil cell data collected on an area detector by shading individual diamond overlay.
- Ronchi, M.; Pizzotti, M.; Orbelli Biroli, A.; Macchi, P.; Lucenti, E.; Zucchi, C. *J. Organomet. Chem.*, **2007**, *692*, 1788-1798.
Synthesis and structural characterization of functionalized cyclotetrasiloxane rings $[\text{4-RC}_6\text{H}_4\text{Si}(\text{O})\text{OR}]_4$ (R = Cl, Br, CH=CH₂, CH₂Cl; R₀ = Na, SiMe₃) as scaffolds for the synthesis of models of a silica bound monolayer of fluorescent or second order NLO active

organic chromophores.

Cariati, E.; Macchi, R.; Roberto, D.; Ugo, R.; Galli, S.; Casati, N.; Macchi, P. (*); Sironi, A.; Bogani, L.; Caneschi, A.; Gatteschi, D. *J. Am. Chem. Soc.*, **2007**, *129*, 9410-9420.

Polyfunctional Inorganic-Organic Hybrid Materials: An Unusual Kind of NLO Active Layered Mixed Metal Oxalates with Tunable Magnetic Properties and Very Large Second Harmonic Generation.

Janosi, L.; Kollar, L.; Macchi, P.; Sironi, A. *Trans. Met. Chem.* **2007**, *32*, 746-752.

Insertion of ethyl diazoacetate into the platinum-carbon bond of Pt(diphosphine)(halide)(aryl) complexes. X-ray structure of the Pt{(2S,4S)-bdpp}(Ph) complex.

D'Arrigo, P.; Giordano, C.; Macchi, P.; Malpezzi, L.; Pedrocchi-Fantoni, G.; Servi, S. *Int J Artif Organs* **2007**, *30*, 133-143.

Synthesis, platelet adhesion and cytotoxicity studies of new glycerophosphoryl-containing polyurethanes.

Buonomenna, M.G.; Macchi, P.; Davoli, M.; Drioli, E. *European Polymer Journal*, **2007**, *43*, 1557-1572.

Poly(vinylidene fluoride) membranes by phase inversion: the role the casting and coagulation conditions play in their morphology, crystalline structure and properties.

Annoni, E.; Pizzotti, M.; Ugo, R.; Quici, S.; Morotti, T.; Casati, N.; Macchi, P. *Inorganica Chim. Acta* **2006**, *359*, 3029-3041.

The effect on E-stilbazoles second order NLO response by axial interaction with M(II) 5,10,15,20-tetraphenyl porphyrinates (M=Zn, Ru, Os); a new crystalline packing with very large holes

Ragaini, F.; Gasperini, M.; Parma, P.; Gallo, E.; Casati, N.; Macchi, P. *New J. Chem.* **2006**, *30*, 1046-1057.

Stability-inducing strain: application to the synthesis of alkyl-BIAN ligands (alkyl-BIAN = bis(alkyl)acenaphthenequinonediimine).

Janosi, L.; Kollar, L.; Macchi, P.; Sironi, A. *J. of Organomet. Chem.* **2006**, *691*, 2846-2852.

Synthesis of platinum-iodo-alkyl/aryl complexes in ligand-exchange reactions: Determination of the structure of Pt{(S,S)-bdpp}(X) complexes (X=Me, I) by X-ray crystallography

Lucenti, E.; D'Alfonso, G.; Macchi, P.; Maranesi, M.; Roberto, D.; Sironi, A.; Ugo, R. *J. Am. Chem. Soc.*, **2006**, *128*, 12054-12055.

A Re(CO)₅ Fragment Bonded to a Polyhedral Oligomeric Hydroxysilsesquioxane as a Model which Gives Further Evidence to the Existence of an Unexpected Re(CO)₅ Surface Species

Macchi, P. (*); Donghi, D.; Sironi, A. *J. Am. Chem. Soc.*, **2005**, *127*, 16494-16504.

The Electron Density of Bridging Hydrides Observed via Experimental and Theoretical Investigations on [Cr₂(μ₂-H)(CO)₁₀](μ₂-H)(CO)₁₀].

Casati, N.; Macchi, P.; Sironi, A. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2005**, *44*, 7736-7739.

Staggered to Eclipsed Conformational Rearrangement of [Co₂(CO)₆(PPh₃)₂] in the Solid State: An X-ray Diffraction Study at High Pressure and Low Temperature.

Bazzini, C.; Brovelli, S.; Caronna, T.; Gambarotti, C.; Giannone, M.; Macchi, P.; Meinardi, F.; Mele, A.; Panzeri, W.; Recupero, F.; Sironi, A.; Tubino, R. *Eur. J. Org. Chem.*, **2005**, 1247-1257.

Synthesis and Characterization of Some Aza[5]helicenes.

Fantauzzi, S.; Gallo, E.; Caselli, A.; Ragaini, F.; Macchi, P.; Casati, N.; Cenini, S. *Organometallics*, **2005**, *24*, 4710 - 4713.

Origin of the Deactivation in Styrene Aziridination by Aryl Azides, Catalyzed by Ruthenium Porphyrin Complexes. Structural Characterization of a 2-1,2,3-Triazoline Rull(TPP)CO Complex.

Ragaini, F.; Gasperini, M.; Gallo, E.; Macchi, P. *Chem. Commun.*, **2005**, 1031-1033.

Using ring strain to inhibit a decomposition path: first synthesis of an Alkyl-BIAN ligand (Alkyl-BIAN = 5bis(alkyl)acenaphthenequinonediimine).

D'Alfonso, G.; Dragonetti, C.; Galli, S.; Lucenti, E.; Macchi, P.; Roberto, D.; Ugo, R. *Can. J. Chem.*, **2005**, *83*, 1017-1024.

Surface organometallic chemistry: Carbonyl complexes of Re(I) with silanolates as models of silica anchored rhenium carbonyl species.

Macchi, P. (*); Sironi, A. *Acta Crystallog.*, **2004**, *A60*, 502-509.

Variable-temperature X-ray crystallographic studies: a complementary tool for charge-density investigation of soft (organometallic) bonds.

Fumagalli, A.; Ulivieri, P.; Costa, M.; Crispu, O.; Della Pergola, R.; de Biani, FF; Laschi, F.; Zanello, P.; Macchi, P.; Sironi, A. *Inorganic Chemistry*, **2004**, *43*, 2125-2131.

Electron transfer and CO addition to polynitrido cobalt carbonyl clusters: Parallel pathways for conversion of the [Co₁₀N₂(CO)₁₉]⁴⁻ anion to the novel [Co₁₁N₂(CO)₂₁]³⁻ anion.

Gasperini, M.; Ragaini, F.; Gazzola, E.; Caselli, A.; Macchi, P. *Dalton Trans.*, **2004**, 3376-3382.

Synthesis of mixed Ar,Ar'-BIAN ligands (Ar,Ar' -BIAN = bis(aryl)acenaphthenequinonediimine). Measurement of the coordination strength of hemilabile ligands with respect to their symmetric counterparts.

Macchi, P. (*); Sironi, A. *Coord. Chem. Rev.*, **2003**, *238-239*, 383-412.

Chemical bonding in transition metal carbonyl clusters: complementary analysis of theoretical and experimental electron densities.

Fumagalli, A.; Costa, M.; Della Pergola, R.; Zanello P.; Fabrizi de Biani, F.; Macchi, P.; Sironi, A. *Inorg. Chim. Acta*, **2003**, *350*, 187-192.
Synthesis, structural and electrochemical characterization of the nitrido-cluster anion $[\text{Co}_{13}\text{N}_2(\text{CO})_{24}]^{3-}$. The different redox propensity of the two isostructural families $[\text{Co}_{13}\text{N}_2(\text{CO})_{24}]^{n-}$ and $[\text{Co}_{13}\text{C}_2(\text{CO})_{24}]^{m-}$.

Farrugia, L. J.; Macchi, P.; Sironi, A., *J. Appl. Cryst.*, **2003**, *36*, 141-145.
Reversible displacive phase transition in $[\text{Ni}(\text{en})_3]^{2+}(\text{NO}_3^-)_2$: a potential temperature calibrant for area-detector diffractometers.

Macchi, P. (*); Garlaschelli, L.; Sironi, A., *J. Am. Chem. Soc.*, **2002**, *124*, 14173-14184.
Electron Density of Semi-Bridging Carbonyls. Metamorphosis of CO Ligands Observed via Experimental and Theoretical Investigations on $[\text{FeCo}(\text{CO})_8]$.

Fumagalli, A.; Malatesta, M.C.; Tentori, A.; Monti, D.; Macchi, P.; Sironi, A. *Inorg. Chem.*, **2002**, *41*, 76-85.
Synthesis and Structural Characterization of the $[\text{Rh}_5(\text{CO})_{14}]-(\text{H}_2\text{N}(\text{CH}_2)_4\text{NH}_2)$ $[\text{Rh}_5(\text{CO})_{14}]^{2-}$ and $[\text{Rh}_5(\text{CO})_{13}(\text{H}_2\text{N}(\text{CH}_2)_2\text{NH}_2)]$ Anions (as $[\text{PPh}_4]^+$ Salts): An Unprecedented Example of Carbonyl Substitution by Alkylamines in a Homoleptic Metal Carbonyl Cluster Anion.

Cariati, E.; Roberto, D.; Ugo, R.; Srdanov, V.I.; Galli, S.; Macchi, P.; Sironi, A., *New J. Chem.*, **2002**, *26*, 13-15.
The acentric nature of trans-stilbazole crystals and the origin of its NLO response.

Macchi, P. (*); Schultz, A. J.; Larsen, F. K.; Iversen, B. B. *J. Phys. Chem. A* **2001**, *105*, 9231-9242.
Experimental and Theoretical Electron Density Study of the Peroxo Function in Oxoperoxo(pyridine-2,6-dicarboxylato)(hexamethylphosphoramide) molybdenum(VI): Implications for Olefin Epoxidation by Peroxo Transition Metal Complexes.

Macchi, P. (*); Coppens, P. *Acta Cryst.*, **2001**, *A57*, 656-662.
Relativistic analytical wave functions and scattering factors for neutral atoms beyond Kr and for all chemically important ions up to I.

Demartin, F.; De Biani, F. F.; Femoni C.; Iapalucci, M.C.; Longoni, G.; Macchi, P.; Zanello, P. J. *Clust. Sci.*, **2001**, *12*, 61-74.
Synthesis, electrochemistry and crystal structure of the $[\text{Ni}_{36}\text{Pt}_4(\text{CO})_{45}]^{6-}$ and $[\text{Ni}_{37}\text{Pt}_4(\text{CO})_{46}]^{6-}$ hexaanions.

Macchi, P. (*); Iversen, B.B.; Sironi, A.; Chakoumakos, B. C.; Larsen, F.K. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2000**, *39*, 2719-2722.
Interanionic O-H...O interactions: the charge density point of view.

Macchi, P. (*); Garlaschelli, L.; Martinengo, S.; Sironi, A. *J. Am. Chem. Soc.*, **1999**, *121*, 10428-10429.
Charge density in transition metal clusters: supported vs. unsupported metal-metal interactions.

Demartin, F.; Femoni, M. C.; Iapalucci, C.; Longoni, G.; Macchi, P. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **1999**, *38*, 531-533.
New Ni-Pt carbonyl clusters with a tetrahedron of platinum atoms encapsulated in an incomplete tetrahedron of nickel atoms: $[\text{Ni}_{36}\text{Pt}_4(\text{CO})_{45}]^{6-}$ and $[\text{Ni}_{37}\text{Pt}_4(\text{CO})_{46}]^{6-}$.

Cerioti, A.; Masciocchi, N.; Macchi, P.; Longoni G. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **1999**, *38*, 3724-3727.
 $[\text{Pt}_{19}(\text{CO})_{21}(\text{NO})]^{3-}$ and $[\text{Pt}_{38}(\text{CO})_{44}]^{2-}$: Nitrosyl bending through intramolecular electron transfer as an intermediate step in the nucleation process from polydecker to ccp platinum carbonyl clusters.

Albano, V. G.; Monari, M.; Demartin, F.; Macchi, P.; Femoni, C.; Iapalucci, M. C.; Longoni, G. *Solid State Sciences*, **1999**, *1*, 597-606.
Synthesis and chemical behavior of $[\text{MFe}_4(\text{CO})_{16}]^{n-}$ (M=Au, Zn, Cd, Hg) clusters: X-ray structure of $[\text{NMe}_3\text{CH}_2\text{Ph}]_2[\text{Au}\{\text{Fe}_2(\text{CO})_8\}_2]\text{Cl}$ and $[\text{PPh}_4]_2[\text{Cd}\{\text{Fe}_2(\text{CO})_6(\mu\text{-CO})_2\}_2]\text{CH}_3\text{CN}$.

Carlucci, L.; Ciani, G.; Macchi, P.; Proserpio, D. M.; Rizzato, S. *Chemistry, Eur. J.*, **1999**, *5*, 237-243.
Complex interwoven polymeric frames from the self-assembly of silver(I) cations and sebaconitriles.

Macchi, P. (*); Proserpio, D. M.; Sironi, A. *J. Am. Chem. Soc.*, **1998**, *120*, 1447-1455.
Experimental electron density studies for investigating the metal π -ligand bond: the case of bis(1,5 cyclooctadiene) nickel.

Macchi, P.; Proserpio, D. M.; Sironi, A.; Soave, R.; Destro, R. *J. Appl. Crystallogr.*, **1998**, *31*, 583-588.
A test of CCD area-detector for accurate electron density studies.

Macchi, P. (*); Proserpio, D. M.; Sironi, A. *J. Am. Chem. Soc.*, **1998**, *120*, 13429-13435.
Experimental Electron Density In A Transition Metal Dimer: Metal-Metal And Metal-Ligand Bonds.

Fumagalli, A.; Martinengo, S.; Tasselli, M.; Ciani, G.; Macchi, P.; Sironi, A. *Inorg. Chem.*, **1998**, *37*, 2826-2828.
Synthesis and structural characterization of the nitrido-carbonyl cluster anion $[\text{Co}_{10}\text{N}_2(\text{CO})_9(\mu\text{-CO})_{10}]^{4-}$ having an unprecedented metal cage built of three condensed trigonal prisms.

Macchi, P. (*); Garlaschelli, L.; Martinengo, S.; Sironi, A. *Inorg. Chem.*, **1998**, *37*, 6263-6268.
Characterization of the solid-solid phase transition of $\text{Co}_2(\text{CO})_6(\text{AsPh}_3)$.

Carlucci, L.; Ciani, G.; Macchi, P.; Proserpio, D. M. *Chem. Commun.*, **1998**, 1837-1838.
An unprecedented triply interpenetrated chiral network of square-planar metal centres from the self assembly of copper(II) nitrate and 1,2-bis(4-pyridyl)ethyne.

Macchi, P.; Proserpio, D. M.; Sironi, A. *Organometallics*, **1997**, *16*, 2101-2109.

Site preference of ligand and metal substitution in trigonal-bipyramidal carbonyl clusters.

CAPITOLI DI LIBRI

Ernst, M.; Dos Santos, L. H. R.; Krawczuk, A.; Macchi, P. (*)

Towards a generalized database of atomic polarizabilities

In *Understanding Intermolecular Interactions in the Solid State – Approaches and Techniques* Edited by D. Chopkra, RSC, pg. 211-242.

Gatti, C.; Macchi, P. (Eds) **2012**, Springer

Modern Charge density analysis

including: Gatti, C.; Macchi, P. (*)

A guided tour through modern charge density analysis, page 1-78

Macchi, P. (*) *Topics in current chemistry*, **2012**, *315*, 33–68

Cryo-crystallography. Diffraction at low temperature and more

special issue in *Advanced X-ray crystallography. The new frontiers*, Ed. K. Rissanen

Farrugia, L. J.; Macchi, P. (*) *Structure & Bonding*, **2012**, *146*, 127-158

Bond Orders in Metal-Metal Interactions Through Electron Density Analysis

special issue in *Electron density and chemical bonding*, Ed. D. Stalke

Macchi, P. (*) in *High-Pressure Crystallography From Fundamental Phenomena to Technological Applications*, Ed. by E. V. Boldyreva and P. Dera, Springer, **2010**

Ab Initio Quantum Chemistry and Semi-Empirical Description of Solid State Phases Under High Pressure: Chemical Applications

Macchi, P. (*) ; Sironi, A. in *The Quantum Theory of Atoms in Molecules From Solid State to DNA and Drug Design*, editors Matta, C. F. and Boyd, R. J, Wiley-VCH, Weinheim 2007.

Metal Involving Interactions: From "Chemical Categories" to QTAIM and Backwards.

COMUNICAZIONI A CONGRESSI E SCUOLE

Macchi, P. *32nd European Crystallographic Meeting*, 22-27 Agosto 2018, Oviedo (Spagna)

The Roots of Quantum Crystallography (Keynote lecture)

Macchi, P. *Annual Meeting of the Serbian Crystallographic Association*, 21-23 giugno 2018, Bajina Basta (Serbia)

Charge and spin density in position and momentum space, density matrices, wave functions and energies of periodic systems, from theory or experiments: in one word – Quantum Crystallography (plenary lecture)

Macchi, P. *52nd Erice course of Crystallography (Quantum crystallography)*, 1-10 Giugno 2018, Erice (Italia)

Atom centered multipolar expansion of the charge density

Atomic polarizabilities and dielectric properties

Macchi, P. *26th Annual meeting of the German crystallographic society*, Essen (Germania), 5-8 Marzo 2018.

Charge and spin density in position and momentum space, density matrices, wave functions and energies of periodic systems, from theory or experiments: in one word – Quantum Crystallography

Macchi, P. *XLIV meeting of the Italian Crystallographic Association*, Perugia (Italia) 26-29 Giugno 2017

Chemical Bonding and reactions in molecular crystals at high-pressure (Plenary Lecture)

Macchi, P. CECAM discussion meeting on *Quantum Crystallography: Current Developments and Future Perspectives*, Nancy (Francia) 21-22 Giugno 2017

Why Refining Wave Functions from Experiments?

Macchi, P. *Hot Topic in Current Crystallography*, Porec (Croazia), 22-26 Aprile 2017

Charge Density of compounds at high pressure

Materials properties from electron density: Polarization and surface charges in molecular crystals

Macchi, P. *ChemBond 2016- Chemical Bonding in Position Space*, Dresden (Germania) 27 Novembre – 1 Dicembre, 2016.

The Bond polarizability

Macchi, P. *30th European Crystallographic Meeting*, Basilea (Svizzera) 28 Agosto -1 Settembre 2016

Pressure induced chemisorption in isorecticular metal organic frameworks.

publicato in Macchi, P.; Lanza, A.; Germann, L. S.; Fisch, M.; Casati, N. *Acta Crystallographica Section A Foundations and Advances*, **2016**, 72, s135-s135

Macchi, P. *1st Robert F. Stewart School on electron density and related properties*, Nancy (Francia) 22-26 Agosto 2016
Polarization and surface charges in molecular crystals

Macchi, P. *7th European Charge Density Meeting*, Warsaw (Polonia), 26 Giugno - 1 Luglio 2016
Polarizabilities of atoms in molecules: the choice of partitioning schemes

Macchi, P. *Asian Charge Density Workshop*, Bangalore (India) 22-26 Febbraio 2015,
General Aspects of Multipole Modelling

Macchi, P. *X-ray diffraction and recent advances in crystallography*, 27-28 Febbraio Peryar (India)
Distributed atomic polarizabilities: a tool to identify efficient functional groups for high refractive index materials (Keynote lecture)

Macchi, P. *World Congress of Advanced Materials*, 27-29 Maggio 2015, Chonging (Cina)
Distributed atomic polarizabilities: a tool to identify efficient functional groups for high refractive index materials

Macchi, P. *XVIII Sagamore Conference*, Santa Margherita di Pula (Italia), 6-12 Giugno 2015
Electron density in molecules under high pressure (Keynote Lecture)

Macchi, P. *XXIII IUCr General Assembly*, Montreal (Canada) 4-12 Agosto 2014
Electron density of molecular crystals at high pressure from synchrotron data
publicato in Macchi, P.; Casati, N.; Kleppe, A.; Jephcoat, A. *Acta Crystallographica*, **2014**, A70, C1340.

Macchi, P. *Structure et Densité Electroniques, Interactions Intermoléculaires*, Nancy (Francia) 20-21 Maggio 2014
Polarization of molecules induced by intermolecular interactions

Macchi P. *Natta Seed's grow*, Milano (Italia) 21-21 Novembre 2013
A reverse crystal Engineering approach

Macchi P. *Meeting of the Italian, Spanish and Swiss crystallographic associations*, Como (Italia) 9-13 Settembre, 2013
Calculation of crystal optical properties from molecular electron density

Macchi P. *Zurich School of Crystallography*, Zurich (Svizzera), 9-22 Giugno 2013
Input and output of a structural refinement

Macchi P. *Synchrotron Charge Density School*, APS Chicago (USA) Marzo 9-15, 2013
Necessities and Pitfalls of the multipolar models
Intermolecular Interactions and lattice energies

Macchi P. *PSI Powder diffraction School*, Villigen (Svizzera) 27-29 Novembre 2012,
Powder diffraction of molecular crystals

Macchi, P. *6th European Charge Density Meeting*, High Tatras (Slovacchia), 15-20 Settembre 2012
Optical properties of organic and organometallic materials from electron density (Keynote Lecture)

Macchi P., *HP Italia*, Trieste (Italia) 12-13 Marzo 2012
High pressure investigations on molecular materials

Macchi, P. *XXII IUCr general assembly*, Madrid (Spagna) 22-30 Agosto 2011
Strong Hydrogen bonds in crystals at high pressure

Macchi P., *Meeting of the American Crystallographic Association*, New Orleans (USA) 28 Maggio - 2 Giugno 2011
Properties of Molecular Materials from Electron Density distribution

Macchi P, *10th PSI Summer School on Condensed matter*, Zugerberg, Zug (Svizzera), 13-19 Agosto 2011
Phase transitions in crystals

Macchi P., *General Assembly of the International Union of Crystallography*, Madrid (Spagna) 22-30 Agosto 2011
Strong Hydrogen bonds in crystals under high pressure

Macchi, P., *XL Congress of the Italian Crystallographic Association*, Siena (Italia) 19-22 Settembre 2011
The high pressure form of Mn₂(CO)₁₀

Macchi, P. *Meetings of the Italian and Spanish Crystallographic Associations*, Oviedo (Spagna) 30 Giugno - 3 Luglio 2010
Crystallography without diffractometers (Keynote Lecture)

Macchi, P. *Electronic Structure: Principles and Applications (Espa 2010)*, Oviedo (Spagna) 29 Giugno - 2 Luglio 2010
Molecular crystals at high pressure (Keynote Lecture)

Macchi, P. *High Pressure crystallography: from novel experimental approaches to applications in cutting edge technologies* (41st course International School of Crystallography), Erice (Italia) 4-14 Giugno 2009

Ab initio quantum chemistry and semi-empirical description of solid state phases under high pressure: chemical application

Macchi, P. *Sagamore XVI*, Santa Fe New Mexico (USA) 2-7 Agosto 2009

Interplay between Theory and Experiment in Charge Density Studies

Macchi P. *Scattering Techniques: From Microscopic To Atomic Structures*, Camerino (Italia), 30 Agosto - 4 Settembre 2009

Crystals and symmetry

WAXS: Single Crystal Diffraction

X-ray charge density analysis

Macchi P.; Casati, N.; Marshall, W.; Sironi, A. *Swiss Crystallographic Meeting*, Fribourg (Svizzera) 8 Settembre. 2009

Hydrogen bond evolution in molecular crystals

Macchi, P. *SIMP-AIC meeting*, Sestri Levante (Italia) 7-12 Settembre 2008

Polarizing microscopy analysis of metal organic frameworks

Macchi, P. *XXI IUCr general assembly*, Osaka (Giappone) 23-31 Agosto 2008

Effects of crystal packing on the electron density of metal carbonyl complexes

Macchi, P. *Meeting dell'associazione tedesca di Chimica*, Ulm (Germania) 16-19 Settembre 2007

Chemical categories and electron density distribution in transition metal complexes

Macchi, P. *Meeting of the American Crystallographic Society*, Salt Lake City (USA) 21-26 Luglio 2007

Molecular crystals under high pressure: solid-solid phase transitions of $\text{Co}_2(\text{CO})_6(\text{XPh}_3)_2$ (X=P, As)

Macchi P *Advanced X-ray diffraction methods, XD2006 workshop*, Martina Franca (Italia) 3-6 Luglio 2007

Electric moments, potential, field and field gradients from a multipolar model

Necessities and Pitfalls of the multipolar models

Intermolecular Interactions and lattice energies

Macchi, P. *Congresso della Società Italiana di Mineralogia e Petrologia*, Fluminimaggiore (Italia) 26-29 Settembre 2006

Densità elettronica e proprietà dei materiali cristallini

Macchi, P. *Meeting of the British Crystallographic Association*, Bath (Regno Unito) 4-6 Aprile 2006

The XD Software Package for Charge Density Analysis

Macchi, P.; Sironi, A. *Workshop: non-ambient diffraction*, Tirrenia (Italia) Marzo 16-18, 2005

Non-ambient diffraction in the laboratory

Macchi, P. *I metodi di diffrazione nell'analisi della materia a livello atomico*, Trieste (Italia), 30 Agosto – 3 Settembre 2004

Quando non basta "schiacciare un bottone"

Macchi, P. *Gordon Research Conference on electron Distribution and Chemical Bonding*, Mount Holyoke (USA), 4-9 Luglio 2004

Useful variables and indicators in chemical bonding analysis

Macchi, P. *XIV Sagamore Conference*, Broome (Australia) 13-18 Agosto 2003

Bonding Effects in Large Metal Cluster Molecules

Macchi, P. *3rd European Charge Density Meeting*, Sanbjerg (Danimarca) 24-29 Giugno 2003

The elusive nature of the metal-metal bond in organometallic clusters (Keynote Lecture)

Macchi, P., Gatti, C. *3rd European Charge Density Meeting*, Sanbjerg (Danimarca) 24-29 Giugno 2003

XD: from multipolar refinement to full topological analysis

Macchi, P. *Advanced X-ray Diffraction Methods*, Buffalo (USA), 12-17 Maggio 2003

The choice of radial functions

Static deformation densities and their analysis

Electron density from multipolar model and the derived properties; the electrostatic potential

Macchi, P. *XXXII Congress of the Italian Crystallographic Association*, Bressanone (Italia) 24-27 Settembre 2002

Accurate X-ray studies on transition metal compounds

Macchi, P. Sironi, A. *XIX IUCr general assembly*, Ginevra (Svizzera) 6-15 Agosto 2002

Low temperature: a 'non-innocent' must for accurate electron density studies

Macchi, P. *Metodi Sperimentali e Teorici di determinazione delle Densità di Carica e di Spin*, Parma (Italia) 18 Settembre 2001

Metodi di raccolta dati di diffrazione a raggi X per studi di densità elettronica

Macchi, P.; Iversen, B. B.; Sironi, A.; McIntyre, G.; Larsen, F. K. *Horizons in Hydrogen Bonding*, Torino (Italia) 3-7 Settembre 2001

Electron Density Studies of O-H...O Interactions in Hydrogen Oxalate and Oxalic Acid Environments

Macchi, P.; Garlaschelli, L.; Sironi, A. *XX European Crystallographic Meeting*, Krakow (Polonia) 25-31 Agosto 2001
Electron density distribution in Metal Carbonyl Clusters: the role of the Madelung Field

Macchi P *XIX European Crystallographic Meeting*, Nancy (Francia) 25-31 Agosto 2000
Inter-anionic Hydrogen Bonds: the charge density point of view

Macchi, P. *2nd European charge density meeting*, Sitges (Spagna) 30 Settembre- 2 Ottobre 1999
The Metal-Metal bond in transition metal compounds

SEMINARI SCIENTIFICI SU INVITO PRESSO ALTRI ATENEI

2017: Università di Nottingham (UK), Dipartimento di Chimica.

2015: Università Di Minas Gerais (Belo Horizonte, Brasile), Dipartimento di Chimica (3 lezioni e due esercitazioni).

2013: Max Plank Institute (Dresda, Germania), Istituto per lo studio della materia allo stato solido.

2013, 2016: Università della Lorena a Nancy (Francia), Laboratorio di Cristallografia, modellazione e magnetismo.

2010: Università di Zurigo, Dipartimento di Chimica.

2009: Università di Oviedo (Spagna), Dipartimento di Chimica.

2009: Università dell'Insubria (Como), Dipartimento di Scienza e Alta Tecnologia.

2009: Paul Scherrer Institute (Villigen, Svizzera), Swiss Light Source.

2008: Università di Glasgow (UK), Dipartimento di Chimica.

2008, 2011: Università Jagiellonian di Cracovia (Polonia), Dipartimento di Chimica.

2008: Università di Aachen, Dipartimento di Chimica.

2008: Università di Augsburg (Germania), Dipartimento di Fisica.

2008: Politecnico Federale di Losanna, Dipartimento di Fisica.

2000, 2003, 2004, 2006, 2008: Università di New York a Buffalo (USA), Dipartimento di Chimica.

DIFFUSIONE DELLA CULTURA SCIENTIFICA

2018: Nel ciclo di Seminari (Bio)Chemie am Samstag ((Bio)Chimica al sabato) **«Quantenkristallographie: klein, geordnet und schnell** (Cristallografia quantistica, piccola e veloce), Università di Berna

2013: Nel ciclo di Seminari (Bio)Chemie am Samstag ((Bio)Chimica al sabato) **«Gulliver im Land der Atome: Eine Reise durch die Struktur der Materie»** (Gulliver nella terra degli Atomi: un viaggio attraverso la struttura della Materia), Università di Berna

2009: Nel ciclo di Seminari (Bio)Chemie am Samstag ((Bio)Chimica al sabato) **«Chemie durchleuchtet: Die Untersuchung molekularer Strukturen in Kristallen»** (La chimica ai raggi X: la ricerca sulle strutture molecolari nei cristalli), Università di Berna (in collaborazione con il Dr. Jürg Hauser, oratore principale)