

## 1. Identification :

Antonino Marco SAITTA  
 Né le 21 mai 1971 à Messine (Italie)  
 Marié, deux enfants  
 Maître de Conférences à l'Université Pierre et Marie Curie (UPMC)  
 Institut de Minéralogie et Physique des Milieux Condensés - UMR 7590  
 Campus Jussieu - 4, Place Jussieu, 75005 Paris  
 Tel : +33.1.44.27.22.44 / Fax : +33.1.44.27.37.85  
 E-mail : marco.saitta@impmc.upmc.fr

## 2. Déroulement de carrière :

- Février 2009      **Qualifié aux fonctions de professeur des universités**  
 CNU - section 28, n. de qualification : 09128100055  
 CNU - section 31, n. de qualification : 09131100055
- 17/10/2008      **Habilitation à diriger des recherches** - Université Pierre et Marie Curie-Paris 6  
 Devant un jury composé par :  
 Bernard Clerjaud (Président)  
 Marie-Claire Bellissent-Funel (Rapporteur)  
 Marie Foret (Rapporteur)  
 Sandro Scandolo (Rapporteur)  
 Bertrand Guillot (Examineur)  
**Titre** : *Structural and thermodynamic high-pressure properties of water in its disordered forms*
- 2000-présent      **Maître de Conférences** à l'Université Pierre et Marie Curie-Paris 6
- 1997-2000      **Stage post-doctoral** - University of Pennsylvania, Philadelphia - USA  
 Responsable : M.L. Klein.  
**Sujet** : *Etude ab initio des propriétés mécaniques de polymères d'intérêt technologique et biologique.*
- 1994-1997      **Thèse de Doctorat** - (*Ph.D. in Condensed Matter Physics*)  
 International School for Advanced Studies (SISSA/ISAS), Trieste, Italie.  
**Titre** : *Theoretical study of the structural, thermodynamic and electronic properties of quaternary semiconductor alloy : (Zn,Mg)(S,Se).*  
 Directeurs de thèse : S. Baroni, S. de Gironcoli.  
 Mention très honorable avec félicitations.
- 1994-1995      **Thèse de Master** - (*Magister Philosophiæ in Condensed Matter Physics*)  
 International School for Advanced Studies (SISSA/ISAS), Trieste, Italie  
**Titre** : *Structural and vibrational properties of cesium hydride : a new high-pressure phase.*  
 Directeur de thèse : S. Baroni.  
 Mention très honorable avec félicitations.
- 1989-1994      **Laurea in Fisica** avec **Thèse de recherche**  
 Université de Messine, Italie  
**Titre** : *Propriétés optiques du silicium poreux : dynamique moléculaire ab initio de nanostructures unidimensionnelles.*  
 Directeurs de thèse : P.V. Giaquinta, F. Buda.  
 Mention très honorable avec félicitations.

## Prix et Primes

- 2009 Attribution pour 2009-2013 de la **Prime Investissement Recherche de 1er niveau** de l'Université Pierre et Marie Curie
- 2006 Lauréat du **European High Pressure Research Groupe (EHPRG) 2006 Award**, attribué annuellement depuis 1990 à un chercheur s'étant particulièrement distingué dans le domaine des hautes pressions.
- 2005 Attribution pour 2005-2009 de la **Prime Encadrement Doctoral et de Recherche** du Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche

## **3. Thèmes de recherche :**

- Propriétés de l'eau sous conditions extrêmes dans toutes ses formes : amorphisation, transitions de phase entre états désordonnés, structure de ces phases, eau supercritique
- Nouvelles propriétés, à pression ambiante et sous haute pression, de solutions ioniques hydratées d'intérêt biologique, géologique ou planétaire
- Développement de méthodes de calcul *ab initio* des spectres optiques
- Calculs *ab initio* des propriétés électroniques et vibrationnelles de nano-systèmes : nanotubes, graphène mono- and bi-feuillets, composés intercalés du graphite, clathrates, fils quantiques
- Propriétés structurales et thermodynamiques de solides moléculaires et minéraux sous pression
- Propriétés structurales, thermodynamiques, vibrationnelles et électroniques de semiconducteurs et d'alliages de semiconducteurs d'intérêt technologique

## Collaborations nationales et internationales (2005-2009)

- J.-L. Hazemann - Grenoble (France)
- R. Almairac, J.L. Sauvajol - Montpellier (France)
- N. Bendiab, W. Wernsdorfer - Grenoble (France)
- M. Haeckel, J.-P. Savy, G. Aloisi (Allemagne)
- S. Baroni, R. Gebauer, B. Walker - Trieste (Italie)
- A.K. Sood, A. Das - Bangalore (Inde)
- R.J. Nelmes, J.S. Loveday, M. Guthrie, M. McMahon - Edimbourg (UK)
- J. Pellicer-Porres, A. Segura - Valence (Espagne)
- P.V. Giaquinta, F. Saija - Messina (Italie)
- T. Strässle - Zurich (Suisse)
- M. Hanfland, T.C. Hansen - Grenoble (France)

## **4. Activités de responsabilités :**

- Participation à 60 % au projet ANR-JCJC HP-QENS
- Participation au projet Emergence-UPMC "Solvatation de métaux précieux"
- Membre élu depuis 2009 du Conseil de la Faculté de Physique de l'Université Pierre et Marie Curie
- Membre nommé de la Commission des Personnels Enseignants de la Faculté de Physique de l'UPMC

- Membre élu depuis 2004 de la Commission de Spécialistes/Comité d'experts section 28 de l'UPMC
- Membre élu depuis avril 2010 au Département de Licence de Physique
- Membre élu 2005-08 du Conseil Scientifique de l'IMPMC
- Expert International du *Comitato di Indirizzo per la Valutazione della Ricerca* italien (CIVR)
- Referee d'importantes revues de recherche, dont *Phys. Rev. Lett.*, *Phys. Rev. B*, *J. Chem. Phys.*, *J. Phys. Chem.*

## 5. Conférences, séminaires et écoles :

### Conférences invitées nationales et internationales

- 2009 *Non-adiabatic effects in layered and conventional metals*  
GDR-DFT++ 2009, Dourdan, France
- 2008 *Modélisation de systèmes sous conditions extrêmes de pression et température*  
GDR-MATINEX 2008, Aix-en-Provence, France
- 2007 *Non-adiabatic effects in the Raman spectra of metallic and semiconducting carbon nanotubes*  
GDR-I-Nano, Grenoble, France
- 2007 (Keynote) *Polyamorphism of salted water*  
EHPRG-AIRAPT Meeting, Catane, Italie
- 2007 *Non-adiabatic effects in the vibrational properties of carbon nanotubes and related systems*  
CCTN07, Rio de Janeiro, Brésil
- 2007 *Structure, translational and orientational order of the amorphous ices*  
SMEC07 Meeting, Miami Beach, USA
- 2007 *Structure of dense liquid water by neutron scattering to 6.5 GPa / 670 K*  
SMEC07 Meeting, Miami Beach, USA
- 2006 *An overview of the phase diagram of water in (some of) its liquid, crystalline, and amorphous forms*  
EHPRG Meeting, Prague, République Tchèque
- 2005 *Amorphization, close-packing and H-bonding in water and ice under extreme conditions*  
American Chemical Society National Meeting, San Diego, CA - USA
- 2005 *Amorphization, close-packing and H-bonding in water and ice under extreme conditions*  
High pressures in physics, chemistry and Earth sciences, Florence, Italie
- 2004 *Modélisation des phénomènes de physique des hautes pressions par calculs classiques et ab initio*  
Forum des Hautes Pressions, Messigny, France
- 2004 *Structure of the high-density amorphous ices*  
IUCr High-Pressure Commission Conference, Saskatoon, Canada
- 2002 *Structure and phase diagram of high-density water*  
CECAM Workshop "Water, silica, and other systems with tetrahedral order", Lyon, France

### Séminaires invités

- 2009 *Propriétés d'eau et de solutions ioniques sous pression*  
Laboratoire Léon Brillouin, Saclay, France
- 2009 *Propriétés électroniques et vibrationnelles de nanotubes de carbone dopés*  
Institut Néel, Grenoble, France
- 2007 *An overview of the phase diagram of water in its liquid, crystalline, and amorphous forms*  
Université Claude Bernard, Lyon, France
- 2006 *Water in its disordered forms*  
Accademia Peloritana dei Pericolanti, sez. Scienze, Messina, Italie
- 2006 *Ab initio study of the structural and vibrational properties of doped carbon nanotubes*  
Université de Montpellier II, France

2004	<i>Structure of the high-density amorphous ices</i> Université Roma Tre, Italie
2003	<i>Structure of water and amorphous ice under pressure</i> Istituto di Tecniche Spettroscopiche (ITS), CNR-Messina, Italie
2003	<i>Structure of water and amorphous ice under pressure</i> University of Messina, Italie
2001	<i>Ab initio phonon calculations from DFPT : Applications to structural phase transitions</i> Table Ronde “Structures et Transitions de Phase” Laboratoire Léon Brillouin (LLB), Saclay, France

### Organisation d'écoles/conférences

Août 10	Responsable et organisateur principal du Minicolloque “Eau, mélanges et solutions aqueuses : du microscopique à l'environnement” Journées de la Matière Condensée, Troyes
Septembre 09	European High-Pressure Research Group (EHPRG) Conference Site “Les Cordeliers”, UPMC, Paris
Septembre 09	Cours “Atomistic (classical and <i>ab initio</i> ) calculations in high-pressure physics”, Ecole “tutorial” dans la conférence EHPRG (niveau chercheurs), Paris
Octobre 04	Université Pierre et Marie Curie, France Organisation du cours “Structural optimization and vibrational and electronic properties in <i>ab initio</i> Calculations” (niveau chercheurs)
Juillet 03	Université de Bordeaux, France Cours “Equations of state and <i>ab initio</i> calculations in high-pressure physics”, Ecole “tutorial” dans la conférence AIRAPT-EHPRG (niveau chercheurs)
Avril 03	Université de Messine, Italie Cours “Statistical mechanics and molecular dynamics” (niveau thésards)
Janvier 03	Abdus Salam International Center for Theoretical Physics, Trieste, Italie Cours “Structural optimization and molecular dynamics in <i>ab initio</i> Calculations” dans le “Winter College on Computational Physics” (niveau thésards/postdocs)

## 6. Enseignement et formation :

### Activité d'enseignement : aspects remarquables

- Responsable 2004-09 de l'Unité d'Enseignement du tronc commun de Licence (L2)  
“*Initiation aux Méthodes Informatique pour la Physique-LP208*” (~ 200 étudiants/an) :  
création et mise en place des cours, TD, TP et de son interface avec les ressources informatiques
- Responsable 2008-10 de l'Unité d'Enseignement du tronc commun de Licence (L3)  
“*Méthodes Numériques pour la Physique-LP324A*” (~ 80 étudiants/an)
- Responsable depuis 2010 du nouveau module “*Physique Numérique-LP329*”  
tronc commun du principal parcours (FP) de la Licence de physique
- Enseignant depuis 2002 à *PHYTEM*, partenariat entre l'UPMC et l'Ecole Normale Supérieure de Cachan
- Enseignant depuis 2009 à *NANOMAT*, Master International de l'UPMC
- Participation active depuis 2000 dans plusieurs enseignements de Physique Numérique, niveau Licence (L3)

- Responsable du site de vie de la Licence de Physique L2

## Encadrement de postdocs, thèses de PhD et stages de master

- Co-encadrant d'un postdoc CNRS :

**Paola Gava**, "*Supraconductivité de nanotubes de carbone et du graphite dopés et/ou intercalés*", Nov 2007-Oct 2009

Elle étudie, sous ma direction, les propriétés de nanotubes et mono- bi- et trifeuillets de graphène dopés. Deux articles ont été publiés dans Phys. Rev. B (numéros 3 et 4 de la liste), et d'autres sont en préparation.

- Directeur de thèse de :

**Romain Jonchière**,

"*Solvatation de métaux précieux*", démarrée en 2010 dans le cadre de "Emergence".

- Co-encadrant (encadrant des calculs théoriques) de thèses à l'UPMC et à l'UJF de Grenoble :

**Christophe Hubert**,

"*Etude de la langatate ( $La_3Ga_{5.5}Ta_{0.5}O_{14}$ ) sous haute pression*", soutenue en 2005.

Au cours de cette thèse on a entrepris le calcul *ab initio* des phonons couplés aux mécanismes de transformation de la langatate sous pression.

**Sandra Ninet**,

"*Etude structurale et vibrationnelle des glaces à liaison hydrogène sous pression*", soutenue en 2006.

On a étudié, par méthodes *ab initio*, les transitions de phase structurales de l'ammoniac cristallin, ainsi que les propriétés vibrationnelles et Raman dans les différentes phases, en parallèle de ses mesures de diffraction X et Raman.

Nos résultats ont été publiés dans les articles 14 et 15 de la liste des publications.

**Cécile Da Silva**,

"*Etudes structurale et vibrationnelle des liaisons hydrogène en solution aqueuse supercritique*", soutenance en 2008.

Cette étudiante grenobloise a réalisé, notamment au cours d'un stage de 3 mois à Paris en 2007, des simulations de dynamique moléculaire *ab initio* sur l'eau sous conditions supercritiques, en parallèle aux différentes expériences (Raman, diffusion X, EXAFS), menées sur ce même système. Nos simulations reproduisent très bien les données Raman, en permettant une correcte interprétation en fonction du faible nombre de liaisons hydrogène de l'eau supercritique. Un article est en préparation.

**Antoine Reserbat-Plantey**,

"*Nanotubes de carbone comme sondes ultrasensibles de Molécules à Spin Unique*", soutenance prévue en 2012.

- Encadrant de deux stages ERASMUS-PhD et codirection de thèse avec l'Université de Messine (Italie) :

**Rubens Esposito-Pino**,

"*Entropy correlations in the high-pressure forms of liquid water*", soutenue en février 2006 ;

au cours de son stage de 3 mois en 2005, on a développé une méthode de calcul des contributions orientationnelles à l'entropie de l'eau.

Nos résultats ont été publiés dans l'article 17 de la liste.

**Emanuela Giuffrè**,

"*Translational and orientational order in high-pressure amorphous ices*", soutenance prévue fin 2009 ;

au cours de son stage de 5 mois en 2008, on a étudié les contributions entropiques aux propriétés structurales et thermodynamiques des différentes phases amorphes de la glace.

Un article est publié dans Journal of Chemical Theory and Computation.

- Encadrant d'une dizaine de stages de Master et de Licence.

Parmi ces stages, celui de M2 de **Nicolas Caudal**, en 2006, a porté sur l'étude *ab initio* du dopage

dans les nanotubes métalliques de carbone. Les résultats ont fait l'objet de la publication 12 dans la liste, déjà très citée dans des articles de fort impact.

- Membre de 2 jurys de thèse à Grenoble, et 1 à Messine (Italie)

## 7. Publications :

Données Bibliométriques
-------------------------

- 50 articles publiés dans des revues à comité de lecture, parmi lesquels :

#	Journal	2006 Impact factor
1	<b>Nature</b>	34.5
2	<b>Nature Materials</b>	29.5
13	<b>Phys. Rev. Lett.</b>	7.3
2	<b>J. Am. Chem. Soc.</b>	8.6
1	<b>J. Chem. Theo. Comp.</b>	4.8
1	<b>Appl. Phys. Lett.</b>	3.6
13	<b>Phys. Rev. B</b>	3.5
2	<b>Phys. Rev. E (Rapid Communications),</b>	2.4
1	<b>Europhys. Lett.</b>	2.9
5	<b>J. Chem. Phys.</b>	3.1
3	<b>J. Phys. Chem. B</b>	3.5
3	<b>Am. Mineral.</b>	1.9

- Impact Factor (IF) cumulé = 308, IF moyen par publication = 5.9
- Nombre total de citations > 1000
- Nombre total de citations dans journaux à fort impact (IF  $\geq$  Phys. Rev. Lett.) : > 100
- h-index = 18

### Articles de vulgarisation commentant mes articles de recherche

1. M. Grousseau, "De la glace salée pour pimenter l'Univers", Journal du CNRS - No. 236, 2009.
2. "Sous haute pression, le phosphore a six voisins", Actualités scientifique du CNRS, 2 janvier 2008, <http://www.cnrs.fr/inp/spip.php?article48>
3. "Phosphorous becomes six-foldcoordinated by oxygen under high pressure", ESRF Highlights, p. 35, 2007.
4. D.D. Klug, "How ice 'melts' below its melting point", Physics World - Volume 18 No. 2 p. 25, 2005.
5. A. Menelle, "Amorphisation de la glace sous pression", Brèves du DRECAM (CEA journal) - No. 138, 2005.
6. M. Maisel, "As Likely as Knot : Biopolymers Under Stress", EnVision - Quarterly Science Magazine - Volume 16 No. 2 - April-June 2000.
7. M. Maisel, "As Likely as Knot : Biopolymers Under Stress", OnLine - News about the NPACI and SDSC Community - Volume IV Issue 10 - May 17, 2000.
8. I. Peterson, "Knotting weakens a polymer molecule", Science News, Vol. 155, No. 19, p. 295, May 8, 1999.

### Publications dans revues à comité de lecture

1. A.P. Seitsonen, **A.M. Saitta**, T. Wassmann, M. Lazzeri, F. Mauri, *Structure and stability of graphene nanoribbons in oxygen, carbon dioxide, water, and ammonia*, Phys. Rev. B **82**, 115425 (2010).
2. T. Wassmann, A.P. Seitsonen, **A.M. Saitta**, M. Lazzeri, and F. Mauri, *Clar's Theory,  $\pi$ -Electron Distribution, and Geometry of Graphene Nanoribbons*, J. Am. Chem. Soc. **132**, 3440 (2010).

3. E. Giuffr , S. Prestipino, F. Saija, **A.M. Saitta**, and P.V. Giaquinta, *Entropy from Correlations in TIP4P Water*, J. Chem. Theory Comput. **6**, 625 (2010).
4. F. Datchi, V.M. Giordano, P. Munsch, **A.M. Saitta**, *Structure of Carbon Dioxide Phase IV : Breakdown of the Intermediate Bonding State Scenario*, Phys. Rev. Lett. **103**, 185701 (2009).
5. S. Klotz, L.E. Bove, Th. Str ssle, T.C. Hansen, **A.M. Saitta**, *The preparation and structure of salty ice VII under pressure*, Nature Materials **8**, 405 (2009).
6. P. Gava, M. Lazzeri, **A.M. Saitta**, and F. Mauri, *Probing the electrostatic environment of bilayer graphene using Raman spectra*, Phys. Rev. B, **80**, 155422 (2009).
7. P. Gava, M. Lazzeri, **A.M. Saitta**, and F. Mauri, *Ab initio study of gap opening and screening effects in gated bilayer graphene*, Phys. Rev. B **79**, 165431 (2009).
8. T. Wassmann, A.P. Seitsonen, **A.M. Saitta**, M. Lazzeri, and F. Mauri, *Structure, Stability, Edge States and Aromaticity of Graphene Ribbons*, Phys. Rev. Lett. **101**, 096402 (2008).
9. N. Bendiab, **A.M. Saitta**, R. Aznar, J.-L. Sauvajol, I. Mirebeau, G. Andre, and R. Almairac, *Rubidium localization in single-walled carbon nanotube bundles : a structural study*, Phys. Rev. B **78**, 104108 (2008).
10. **A.M. Saitta**, M. Lazzeri, M. Calandra, and F. Mauri, *Giant non-adiabatic effects in layer metals : Raman spectra of intercalated graphite explained*, Phys. Rev. Lett. **100**, 226401 (2008).
11. A. Das, A.K. Sood, A. Govindaraj, **A.M. Saitta**, M. Lazzeri, F. Mauri, and C.N.R Rao, *Doping in Carbon Nanotubes Probed by Raman and Transport Measurements*, Phys. Rev. Lett. **99**, 136803 (2007).
12. J. Pellicer-Porres, **A.M. Saitta**, A. Polian, J.P. Iti , and M. Hanfland, *Sixfold coordinated phosphorus by oxygen in  $AlPO_4$  quartz homeotype under high pressure*, Nature Materials **6**, 698 (2007).
13. N. Caudal, **A.M. Saitta**, M. Lazzeri, and F. Mauri, *Kohn anomalies and non-adiabaticity in doped carbon nanotubes*, Phys. Rev. B **75**, 115423 (2007).
14. J. Pellicer-Porres, A. Segura, E. Mart nez, **A.M. Saitta**, A. Polian, J.C. Chervin, B. Canny, Phys. Rev. B **74**, 139902 (2006).
15. S. Ninet, F. Datchi, **A.M. Saitta**, M. Lazzeri, and B. Canny, *Raman spectrum of ammonia IV*, Phys. Rev. B **74**, 104101 (2006).
16. F. Datchi, S. Ninet, M. Gauthier, **A.M. Saitta**, B. Canny, and F. Decremps, *Solid ammonia at high pressure : a single-crystal x-ray diffraction study to 123 GPa*, Phys. Rev. B **73**, 174111 (2006).
17. S. Klotz, Th. Str ssle, G. Hamel, R.J. Nelmes, J.S. Loveday, G. Hamel, G. Rousse, B. Canny, J.-C. Chervin, and **A.M. Saitta**, Phys. Rev. Lett. **96**, 149602 (2006).
18. R. Esposito, F. Saija, **A.M. Saitta**, and P.V. Giaquinta, *Entropy-based measure of structural order in water*, Phys. Rev. E (Rapid Communications) **73**, 040502 (2006).
19. **A.M. Saitta**, Th. Str ssle, and S. Klotz, *Temperature-induced topological differentiation of the two high-density amorphous ices*, Europhys. Lett. **74**, 445 (2006).
20. B. Walker, **A.M. Saitta**, R. Gebauer, and S. Baroni, *A new and efficient approach to time-dependent density-functional perturbation theory for optical spectroscopy*, Phys. Rev. Lett. **96**, 113001 (2006).
21. **A.M. Saitta**, Th. Str ssle, and S. Klotz, *Structural properties of the amorphous ices : an analysis in terms of distance-ranked neighbors and angular correlations*, J. Phys. Chem. B **110**, 3595 (2006).
22. Th. Str ssle, **A.M. Saitta**, Y. LeGodec, J.S. Loveday, R.J. Nelmes, G. Hamel, and S. Klotz, *Structure of dense liquid water by neutron scattering to 6.5 GPa / 670 K*, Phys. Rev. Lett. **96**, 067801 (2006).
23. J. Pellicer-Porres, A. Segura, E. Mart nez, **A.M. Saitta**, A. Polian, J.C. Chervin, B. Canny, *Vibrational properties of delafossite  $CuGaO_2$  at ambient and high pressure*, Phys. Rev. B **72**, 064301 (2005).
24. G. Rousse, **A.M. Saitta**, S. Klotz, J. Rodriguez-Carvajal, B. Couzinet, M.I. McMahon, *Structure of the intermediate phase of  $PbTe$  at high pressure*, Phys. Rev. B **71**, 224116 (2005).
25. S. Klotz, Th. Str ssle, G. Hamel, R.J. Nelmes, J.S. Loveday, G. Hamel, G. Rousse, B. Canny, J.-C. Chervin, and **A.M. Saitta**, *Nature of the polyamorphic transition in ice under pressure*, Phys. Rev. Lett. **94**, 025506 (2005).
26. E. Balan, M. Lazzeri, **A.M. Saitta**, T. Allard, Y. Fuchs, and F. Mauri, *First-principles study of OH stretching modes in kaolinite, dickite and nacrite*, Am. Mineral. **90**, 50 (2005).
27. S. Klotz, Th. Str ssle, **A.M. Saitta**, G. Rousse, G. Hamel, R.J. Nelmes, J.S. Loveday, and M. Guthrie, *In-situ neutron diffraction studies of HDA ice under pressure*, J. Phys. : Cond. Matter **17**, S967 (2005).

28. Th. Strässle, **A.M. Saitta**, M. Braden, and S. Klotz, *Phonon dispersions of ordinary ice  $I_h$  under pressure*, Phys. Rev. Lett. **93**, 225901 (2004).
29. **A.M. Saitta**, Th. Strässle, G. Rousse, G. Hamel, S. Klotz, R.J. Nelmes, and J.S. Loveday, *Very-high density amorphous ice : the close-packed limit of disordered water*, J. Chem. Phys. **121**, 8430 (2004).
30. **A.M. Saitta** and F. Decremps, *Unifying description of the wurtzite-to-rocksalt phase transition in wide-gap semiconductors : the role of d electrons*, Phys. Rev. B **70**, 035214 (2004).
31. D. Connétable, V. Timoshevskii, B. Masellini, **A.M. Saitta**, G.M. Rignanese, P. Mélinon, and X. Blase, *Superconductivity in doped column-IV  $sp^3$  semiconductors : the case of clathrates*, Phys. Rev. Lett. **91**, 247001 (2003).
32. F. Saija, **A.M. Saitta**, and P.V. Giaquinta, *Statistical entropy and density maximum anomaly in liquid water*, J. Chem. Phys. **119**, 3587 (2003).
33. F. Decremps, F. Datchi, **A.M. Saitta**, A. Polian, S. Pascarelli, A. Di Cicco, J.P. Itié, and F. Baudelet, *Local structure of condensed zinc oxide*, Phys. Rev. B **68**, 104101 (2003).
34. **A.M. Saitta** and F. Datchi, *Structure and phase diagram of high-density water : the role of interstitial molecules*, Phys. Rev. E (Rapid Communications) **67**, 020201(R) (2003).
35. **A.M. Saitta** and M.L. Klein, *Proton Tunneling in Fatty Acid/Soap Crystals ?*, J. Chem. Phys. **118**, 1 (2003).
36. E. Balan, F. Mauri, C. Lemaire, C. Brouder, F. Guyot, **A.M. Saitta**, and B. Devouard, *Multiple plasmon resonances in naturally occurring multiwall nanotubes : Infrared spectra of chrysotile asbestos*, Phys. Rev. Lett. **89**, 177401 (2002).
37. F. Decremps, F. Datchi, **A.M. Saitta**, J.P. Itié, A. Polian, F. Baudelet, and S. Pascarelli, *Pressure dependence of the wurtzite ZnO structure*, High Press. Res. **22**, 365 (2002).
38. E. Balan, **A.M. Saitta**, F. Mauri, C. Lemaire, and F. Guyot, *First-principles calculation of the infrared spectrum of lizardite*, Am. Mineral. **87**, 1286 (2002).
39. **A.M. Saitta** and M.L. Klein, *Influence of a knot on the stretching-induced crystallization of a polymer*, J. Chem. Phys. **116**, 5333 (2002).
40. F. Decremps, J. Pellicer-Porres, **A.M. Saitta**, J.-C. Chervin, and A. Polian, *High-pressure Raman spectroscopy study of wurtzite ZnO*, Phys. Rev. B **65**, 092101 (2002).
41. E. Balan, **A.M. Saitta**, F. Mauri, and G. Calas, *First-principles modeling of the infrared spectrum of kaolinite*, Am. Mineral. **86**, 1321 (2001).
42. **A.M. Saitta** and M.L. Klein, *First-principles molecular dynamics study of the rupture processes of a bulklike polyethylene knot*, J. Phys. Chem. B **105**, 6495 (2001).
43. **A.M. Saitta** and M.L. Klein, *First Principles Study of Limiting Stress and Bond Rupture of Entangled Polymer Chains*, J. Phys. Chem. B **104**, 2197 (2000).
44. **A.M. Saitta** and M.L. Klein, *Evolution of Fragments Formed at the Rupture of a Knotted Alkane Molecule*, J. Am. Chem. Soc. **121**, 11827 (1999).
45. **A.M. Saitta** and M.L. Klein, *Polyethylene under Tensile Load : Strain Energy Storage and Breaking of Linear and Knotted Alkanes Probed by First-Principles Molecular Dynamics Calculations*, J. Chem. Phys. **111**, 9434 (1999).
46. **A.M. Saitta**, S. de Gironcoli, and S. Baroni, *Effects of Disorder on the Optical Gap of the (Zn,Mg)(S,Se) Quaternary Alloy*, Appl. Phys. Lett. **75**, 2746 (1999).
47. **A.M. Saitta**, P.D. Soper, E. Wasserman, and M.L. Klein, *Influence of a Knot on the Strength of a Polymer Strand*, Nature **399**, 46 (1999).
48. **A.M. Saitta**, S. de Gironcoli, and S. Baroni, *Structural and Electronic Properties of a Wide-Gap Quaternary Solid Solution : (Zn,Mg)(S,Se)*, Phys. Rev. Lett. **80**, 4939 (1998).
49. **A.M. Saitta**, D. Alfè, S. de Gironcoli, and S. Baroni, *Phonon Softening and Elastic Instabilities in the Cubic-to-Orthorhombic Structural Transition of CsH*, Phys. Rev. Lett. **78**, 4958 (1997).
50. **A.M. Saitta**, F. Buda, G. Fiumara, and P.V. Giaquinta, *Ab Initio Molecular Dynamics of Silicon Quantum Wires : Orientational Effects*, Phys. Rev. B **53**, 1446 (1996).