

Università degli Studi di PERUGIA >> Dipartimento: "CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"

Scheda chiusa il 22/04/2020 09:43

Sezione A - Informazioni generali

QUADRO A.1		A.1 Struttura del Dipartimento										
Ateneo	Università degli Studi di PERUGIA											
Struttura	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE											
Direttore	Alceo Macchioni											
Referente tecnico del portale	ALCEO MACCHIONI, email: alceo.macchioni@unipg.it, telefono: 0755855634											
Altro Referente tecnico del portale	CRISTINA MENCOLINI, email: cristina.mencolini@unipg.it											
Aree CUN del Dipartimento e personale che vi afferisce												
Codice Area	Descrizione Area	Prof. Ordinari	Prof. Associati	Ricer- catori	Assi- stenti	Prof. Ordinario r.e.	Straor- dinari a t.d.	Ricer- catori a t.d.	Asse- gnisti	Dotto- randi	Specia- lizzandi	Totale
03	Scienze chimiche	13	13	7	0	0	0	3	8	0	0	44
05	Scienze biologiche	4	6	14	0	0	0	3	7	0	0	34
06	Scienze mediche	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	2
-	Nessuna Afferenza	0	0	0	0	0	0	0	0	22	0	22
Totale		17	20	22	0	0	0	6	15	22	0	102
Indicatore Standardizzato della Performance Dipartimentale (ISPD)					99,0							
Incidenza delle Aree Cun nel Calcolo dell'ISPD												

Aree preminenti (sopra la media)	03 - Scienze chimiche
Altre Aree (sotto la media)	05 - Scienze biologiche 06 - Scienze mediche
Quintile dimensionale	4

Sezione B - Selezione dell'area CUN

QUADRO B.1	B.1 Area CUN del progetto ed eventuali aree CUN da coinvolgere
Area CUN del progetto	03 - Scienze chimiche
Eventuali ulteriori Aree CUN da coinvolgere	05 - Scienze biologiche 06 - Scienze mediche
QUADRO B.2	B.2 Referente
Da aggiornare nel caso in cui sia cambiato il referente	
Referente	MACCHIONI Alceo Prof. Ordinario CHIM/03

Sezione C - Risorse a disposizione del progetto

QUADRO C	C Risorse per la realizzazione del progetto
<i>Campo non modificabile</i>	

Sezione D - Descrizione del progetto

QUADRO D.1	D.1 Stato dell'arte del Dipartimento
<i>Si utilizzano le informazioni fornite in sede di candidatura, il campo non è modificabile</i>	
QUADRO D.2	D.2 Obiettivi complessivi di sviluppo del dipartimento
<i>Si utilizzano le informazioni fornite in sede di candidatura, il campo non è modificabile</i>	
QUADRO D.3	D.3 Strategie complessive di sviluppo del progetto

Si utilizzano le informazioni fornite in sede di candidatura, il campo non è modificabile

QUADRO D.4

D.4 Reclutamento del personale

Descrizione azioni realizzate nel 2019

Cessazioni di personale intercorse dall'avvio dei progetti il 1 gennaio 2018:

Nessun nominativo

Cessazioni di personale intercorse dal 1/1/2018:

Bellachioma Gianfranco, PA, CHIM/03

Ruzziconi Renzo, PO, CHIM/06

Fernando Pirani; PO CHIM/03

Gaia Grossi, PO, CHIM/03

Antonio Cipiciani, PA, CHIM/06

Tutto il reclutamento del personale strutturato previsto dal progetto AMIS è stato effettuato nell'anno 2018.

Nel 2019 è stato attribuito 1 assegno di ricerca sulle tematiche del progetto, a valere su fondi esterni al progetto.

1. Dr.ssa Ilaria Corbucci, rinnovato in data 5/2019: Progetto: "Caratterizzazione del contenuto in carbonio organico ed elementare e principali ioni inorganici nel particolato atmosferico campionato presso il sito remoto di Monte Martano (rete Europea EMEP)." Responsabile: David Cappelletti, per le finalità del Laboratorio TRACES.

QUADRO D.5

D.5 Infrastrutture

Descrizione azioni realizzate nel 2019

Sono proseguite le azioni di acquisto o espletamento delle procedure di gara per l'acquisizione della media e grande strumentazione prevista da progetto.

In particolare sono state acquistate

laboratorio TRACES

N. 1 Spettrometro di massa (triplo quadrupolo) con sorgente ICP (ICP-MS-QQQ) con autocampionatore;

laboratorio PHOTOCHEM

N. 1 Sistema di acquisizione ed elaborazione dati spettrali

laboratorio FASST

Realizzazione N. 2 prototipi di box per la realizzazione dei moduli di reattori in flusso continuo: 1 per la gestione dei flussi in gas, uno per la gestione dei flussi con sistema di separazione in continuo

Realizzazione N. 1 sistema di distillazione/essiccamento di reflui di reazione, e sistema di evaporazione

N. 1 modulo per l'analisi di ossigeno e cloro

N. 1 reattore microonde DISCOVER

laboratorio NANO4LIGHT

N. 1 Microscopio confocale integrato Raman e Fluorescenza ;

N. 1 Analizzatore di particelle basato su Dynamic-Light Scattering completo di misuratore di potenziale-zeta

laboratorio H-ECO TOX

N. 1 Sistema High Content Imaging "Operetta" per lo studio della tossicità umana e ambientale

laboratorio MPC

- Gruppi di pompaggio da vuoto ed ultra-alto vuoto.

Inoltre sono state rinnovate alcune apparecchiature di utilizzo Dipartimentale presso l'officina meccanica.

Con questa azione la quota di budget previsto da progetto utilizzata è arrivata circa al 85%.

In questo secondo anno le attività di ricerca previste nel progetto AMIS sono continuate appoggiandosi alle strutture dipartimentali esistenti, in attesa della realizzazione di spazi dedicati, prevista per l'anno 2020.

A tale riguardo il Consiglio di Amministrazione dell'Ateneo nella seduta del 27 novembre 2019 ha approvato il DPP di lavori e l'affidamento dei servizi di ingegneria di messa a norma di alcuni locali ai piani secondo, terzo e quinto edificio Chimica A, e al terzo piano edificio Chimica B, Perugia. La cronologia presunta dell'intervento sarà la seguente:

03/02/2020 inizio della progettazione

18/04/2020 fine progettazione (preliminare + esecutiva per 75 giorni)

30/04/2020 verifica progetto

15/06/2020 avvio dei lavori. Se si dovesse rendere necessarie autorizzazioni edilizie per il completamento dei lavori, allo stato non prevedibili, si procederà in parallelo con l'esecuzione dei lavori che possono realizzati nell'immediato e conseguentemente alla richiesta delle autorizzazioni per le parti dei lavori rimasti

20/09/2020 fine lavori

30/09/2020 Arredi e allacci cappe

31/10/2020 consegna locali.

Nel 2019 sono stati pubblicati i seguenti articoli scientifici sulle tematiche delle nuove attività di ricerca del progetto AMIS, che è stato menzionato nei ringraziamenti.

- L. Monico, L. Sorace, M. Cotte, W. de Nolf, K. Janssens, A. Romani, C. Miliani Disclosing the Binding Medium Effects and the Pigment Solubility in the (Photo) reduction Process of Chrome Yellows (PbCrO₄/PbCr_{1-x}S_xO₄) ACS Omega, (2019) 4(4), 6607-6619
- C. Petroselli, B. Moroni, S. Crocchianti, R. Selvaggi, R. Vivani, F. Soggia, M. Grotti, F. D'Acapito, D. Cappelletti Iron Speciation of Natural and Anthropogenic Dust by Spectroscopic and Chemical Methods Atmosphere, 2019, 10, 8.
- B. Moroni, S. Crocchianti, C. Petroselli, R. Selvaggi, S. Becagli, R. Traversi, D. Cappelletti
Potential source contribution function analysis of long-range transported aerosols in the Central Mediterranean: a comparative study of two background sites in Italy
Rendiconti Lincei. Scienze Fisiche e Naturali (2019) 30:337-349
- G. Massaro, G. Zampini, D. Ruiz-Molina, J. Hernando, C. Roscini, L. Latterini
Thermal Control of Intermolecular Interactions and Tuning of Fluorescent State Energies
J. Phys. Chem. C, 2019, 123, 8, 4632-4637
- L. Tarpani, F. Bellezza, P. Sassi, M. Gambucci, A. Cipiciani, L. Latterini New Insights on the Effects of Surface Functionalization on the Peroxidase Activity of Cytochrome c Adsorbed on Silica Nanoparticles J. Phys. Chem. B, 2019, 123, 11, 2567-2575
- F. Pirani, D. Cappelletti, S. Falcinelli, D. Cesario, F. Nunzi, L. Belpassi, F. Tarantelli Selective Emergence of the Halogen Bond in Ground and Excited States of NobleGas-Chlorine Systems Angew. Chem. Int. Ed.. 58, 4195-4199 (2019)
- F. Nunzi, D. Cesario, L. Belpassi, F. Tarantelli, L.F. Roncaratti, S. Falcinelli, D. Cappelletti, F. Pirani
Insight into the halogen-bond nature of noble gas-chlorine systems by molecular beam scattering experiments, ab initio calculations and charge displacement analysis
Phys.Chem.Chem.Phys. 21, 7330-7340 (2019)
- D. Cappelletti, A. Cinti, A. Nicoziani, S. Falcinelli, F. Pirani
Molecular Beam Scattering Experiments as a Sensitive Probe of the Interaction in Bromine-Noble Gas Complexes
Frontiers Chemistry 7, 320 (2019)
- S. G. Motti, D. Meggiolaro, A. J. Barker, E. Mosconi, C. A. R. Perini, J. M. Ball, M. Gandini, M. Kim, F. De Angelis, A. Petrozza
Controlling competing photochemical reactions stabilizes perovskite solar cells
Nature Photonics, 2019, (in press)
- S. Fantacci, F. De Angelis
Ab initio modeling of solar cell dye sensitizers: The hunt for red photons continues
Eur. J. Inorg. Chem., 2019, 6, 743

- D. Meggiolaro, E. Mosconi, F. De Angelis
Formation of Surface Defects Dominates Ion Migration in Lead-Halide Perovskites
ACS Energy Letters, 2019, 4, 779
- S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, P. Antoniotti, F. Nunzi
Complexes of the Noble-Gas Atoms with Hydrogen Halides: Theoretical Insights into Weakest Hydrogen and Halogen Bonds
J. Comput. Chem. 2019
- E. Radicchi, E. Mosconi, F. Elisei, F. Nunzi, F. De Angelis
Understanding the Solution Chemistry of Lead Halide Perovskites Precursors
ACS Appl. Energy Mater. 2019, 2, 5, 3400-3409
- D. Cesario, M. Fortino, T. Marino, F. Nunzi, N. Russo, E. Sicilia
The Role Of The Halogen Bond In Iodothyronine Deiodinase: Dependence On Chalcogen Substitution In NaphthylBased Mimetics
J. Comput. Chem., 2019. 40(8), 944-951
- D. Sorbelli, L. Nunes dos Santos Comprido, G. Knizia, A. S. K. Hashmi, L. Belpassi, P. Belanzoni, J. E. Klein
Cationic Gold (I) Diarylallenylidene Complexes: Bonding Features and Ligand Effects
ChemPhysChem, 2019
- D. Ricciarelli, Q. M. Phung, L. Belpassi, J.N. Harvey, P. Belanzoni
Understanding the Reactivity of Mn-Oxo Porphyrins for Substrate Hydroxylation: Theoretical Predictions and Experimental Evidence Reconciled
Inorg. Chem., 2019 58, 11, 7345-7356
- L. Gregori, D. Sorbelli, L. Belpassi, F. Tarantelli, P. Belanzoni
Alkyne Activation with Gold(III) Complexes: A Quantitative Assessment of the Ligand Effect by Charge-Displacement Analysis
Inorg. Chem. 2019, 58, 5, 3115-3129
- A. Singh, E. Radicchi, S. Fantacci, F. De Angelis, A. Gagliardi
Interface Electrostatics of Solid-State Dye-Sensitized Solar Cells: A Joint Drift-Diffusion and Density Functional Theory Study
J. Phys. Chem. C., 2019
- A. Bernasconi, A. Rizzo, A. Listorti, A. Mahata, E. Mosconi, F. De Angelis, L. Malavasi
Synthesis, Properties and Modelling of Cs_{1-x}Rb_xSnBr₃ Solid Solution: a New Mixed-cation Lead-free All-Inorganic Perovskite System
Chem. Mater. 2019, 31, 9, 3527-3533
- E. Cinquanta, D. Meggiolaro, S. G. Motti, M. Gandini, M.J. Alcocer, Q.A. Akkerman, C. Vozzi, L. Manna, F. De Angelis, A. Petrozza, S. Stagira

S. Ultrafast THz Probe of Photoinduced Polarons in Lead-Halide Perovskites

Phys. Rev. Lett., 2019, 122(16), 166601

Z. Ni, L. Goracci, G. Cruciani, M. Fedorova

Computational solutions in redox lipidomics - Current strategies and future perspectives

Free Radic Biol Med, (2019)

A. Macchioni

The Middle-Earth between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis in Water Oxidation with Iridium

Eur. J. Inorg. Chem. 2019 (2019) 7-17

A. Macchioni

Raffaello Nasini: An Eclectic Chemist Heralding the Interdisciplinary Essence of Inorganic Chemistry

Eur. J. Inorg. Chem. 2019 (2019) 546-549

F. Zaccaria, C. Zuccaccia, R. Cipullo, P.H.M. Budzelaar, A. Macchioni, V. Busico, C. Ehm

BHT-Modified MAO: Cage Size Estimation, Chemical Counting of Strongly Acidic Al Sites, and Activation of a Ti-Phosphinimide Precatalyst

ACS Catal. 9 (2019) 2996-3010

F. Zaccaria, C. Zuccaccia, R. Cipullo, A. Macchioni

Extraction of Reliable Molecular Information from Diffusion NMR Spectroscopy: Hydrodynamic Volume or Molecular Mass?

Chem. - A Eur. J. 25 (2019) 9930-9937

I. Corbucci, F. Zaccaria, R. Heath, G. Gatto, C. Zuccaccia, M. Albrecht, A. Macchioni

Iridium Water Oxidation Catalysts Based on Pyridine-Carbene Alkyl-Substituted Ligands

ChemCatChem. 11 (2019) 5353-5361

M.M. Ghimire, O.C. Simon, L.M. Harris, A. Appiah, R.M. Mitch, V.N. Nesterov, A. Macchioni, C. Zuccaccia, H. Rabaï¹/₂, R. Galassi, M.A. Omary

Binary Donor-Acceptor Adducts of Tetrathiafulvalene Donors with Cyclic Trimetallic Monovalent Coinage Metal Acceptors

Inorg. Chem. 58 (2019), 15303-15319

F. Zaccaria, C. Zuccaccia, R. Cipullo, P.H.M. Budzelaar, A. Macchioni, V. Busico, C. Ehm

On the Nature of the Lewis Acidic Sites in "TMA-Free" Phenol-Modified Methylaluminoxane

Eur. J. Inorg. Chem. 2019 (2019) 29-31

L. Sian, A. Guerriero, M. Peruzzini, C. Zuccaccia, L. Gonsalvi, A. Macchioni

Diffusion NMR Studies on the Self-Aggregation of Ru-Arene CAP Complexes: Evidence for the Formation of H-Bonded Dicationic Species in Acetonitrile

Organometallics. (2019).

M. Campanelli, T. Del Giacco, F. De Angelis, E. Mosconi, M. Taddei, F. Marmottini, R. D'Amato, F. Costantino
Solvent-Free Synthetic Route for Cerium (IV) Metal-Organic Frameworks with UiO-66 Architecture and Their Photocatalytic Applications
ACS applied materials & interfaces (2019) 11, 45031-45037.

G. Gatto, A. Macchioni, R. Bondi, F. Marmottini, F. Costantino
Post Synthetic Defect Engineering of UiO-66 Metal-Organic Framework with An Iridium (III)-HEDTA Complex and Application in Water Oxidation Catalysis
Inorganics (2019), 7 (10), 123.
<https://doi.org/10.3390/inorganics7100123>

E. Boccalon, M. Nocchetti, M. Pica, A. Romani and M. Casciola
Composite sodium alginate-ion exchangers as clearing systems for the removal of gypsum efflorescences
Applied Clay Science 181 (2019) 105216.
<https://doi.org/10.1016/j.clay.2019.105216>

M. Nocchetti, M. Pica, B. Ridolfi, A. Donnadio, E. Boccalon, G. Zampini, D. Pietrella and M. Casciola
AgCl-ZnAl Layered Double Hydroxides as Catalysts with Enhanced Photodegradation and Antibacterial Activities
Inorganics 7 (2019) 120.
<https://doi.org/10.3390/inorganics7100120>

Mujahed, S., Valentini, F., Cohen, S., Vaccaro, L., Gelman, D.
Polymer-Anchored Bifunctional Pincer Catalysts for Chemoselective Transfer Hydrogenation and Related Reactions
(2019) ChemSusChem, 12 (20), pp. 4693-4699
<https://doi.org/10.1002/cssc.201901728>

Livingston, A., Trout, B.L., Horvath, I.T., Johnson, M.D., Vaccaro, L., Coronas, J., Babbitt, C.W., Zhang, X., Pradeep, T., Drioli, E., Hayler, J.D., Tam, K.C., Kappe, C.O., Fane, A.G., Szekely, G.

Challenges and directions for green chemical engineering-role of nanoscale materials
(2019) Sustainable Nanoscale Engineering: From Materials Design to Chemical Processing, pp. 1-18

Ferlin, F., Yetra, S.R., Warratz, S., Vaccaro, L., Ackermann, L.
Reusable Pd@PEG Catalyst for Aerobic Dehydrogenative C-H/C-H Arylations of 1,2,3-Triazoles
(2019) Chemistry - A European Journal, 25 (49), pp. 11427-11431

Valentini, F., Kozell, V., Petrucci, C., Marrocchi, A., Gu, Y., Gelman, D., Vaccaro, L.
Formic acid, a biomass-derived source of energy and hydrogen for biomass upgrading
(2019) Energy and Environmental Science, 12 (9), pp. 2646-2664

Bagherzadeh, M., Mahmoudi, H., Ataie, S., Bahjati, M., Kia, R., Raithby, P.R., Vaccaro, L.

Synthesis and characterization of a new zwitterionic palladium complex as an environmentally friendly catalyst for the Heck-Mizoroki coupling reaction in GVL

(2019) *Molecular Catalysis*, 474, art. no. 110406

<https://doi.org/10.1016/j.mcat.2019.110406>

El-Harairy, A., Yiliqi, Lai, B., Vaccaro, L., Li, M., Gu, Y.

A Sulfone-Containing Imidazolium-Based Brønsted Acid Ionic Liquid Catalyst Enables Replacing Dipolar Aprotic Solvents with Butyl Acetate

(2019) *Advanced Synthesis and Catalysis*, 361 (14), pp. 3342-3350

<https://doi.org/10.1002/adsc.201900246>

Ferlin, F., Giannoni, T., Zuliani, A., Piermatti, O., Luque, R., Vaccaro, L.

Sustainable Protocol for the Reduction of Nitroarenes by Heterogeneous Au@SBA-15 with NaBH₄ under Flow Conditions

(2019) *ChemSusChem*, 12 (13), pp. 3178-3184

<https://doi.org/10.1002/cssc.201802359>

Bagherzadeh, M., Mahmoudi, H., Ataie, S., Hafezi-Kahnamouei, M., Shahrokhian, S., Bellachioma, G., Vaccaro, L.

Synthesis, characterization, and comparison of two new copper(II) complexes containing Schiff-base and diazo ligands as new catalysts in CuAAC reaction

(2019) *Inorganica Chimica Acta*, 492, pp. 213-220

<https://doi.org/10.1016/j.ica.2019.04.036>

Santoro, S., Ferlin, F., Ackermann, L., Vaccaro, L.

C-H functionalization reactions under flow conditions

(2019) *Chemical Society Reviews*, 48 (10), pp. 2767-2782

<https://doi.org/10.1039/c8cs00211h>

Trombettoni, V., Franco, A., Sathicq, A.G., Len, C., Romanelli, G.P., Vaccaro, L., Luque, R.

Efficient Liquid-Assisted Grinding Selective Aqueous Oxidation of Sulfides Using Supported Heteropolyacid Catalysts

(2019) *ChemCatChem*, 11 (10), pp. 2537-2545

<https://doi.org/10.1002/cctc.201900296>

Gandeepan, P., Kaplaneris, N., Santoro, S., Vaccaro, L., Ackermann, L.

Biomass-Derived Solvents for Sustainable Transition Metal-Catalyzed C-H Activation

(2019) *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*, 7 (9), pp. 8023-8040

<https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.9b00226>

Valentini, F., Mahmoudi, H., Bivona, L.A., Piermatti, O., Bagherzadeh, M., Fusaro, L., Aprile, C., Marrocchi, A., Vaccaro, L.

Polymer-Supported Bis-1,2,4-triazolium Ionic Tag Framework for an Efficient Pd(0) Catalytic System in Biomass Derived γ -Valerolactone
(2019) ACS Sustainable Chemistry and Engineering, 7 (7), pp. 6939-6946
<https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.8b06502>

Vaccaro, L., Santoro, S., Luciani, L., Melone, C., Ferlin, F.
Polarclean from waste valorization of Nylon 66 manufacturing: A sustainable solvent for organic synthesis
(2019) Chimica Oggi/Chemistry Today, 37 (1), pp. 60-63
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85063346182&partnerID=40&md5=80e0cea46e45072d8d5e1e0707dd73e4>

Trombettoni, V., Campana, F., Marrocchi, A., Vaccaro, L.
CHAPTER 5: Sustainable Batch or Continuous-flow Preparation of Biomass-derived Fuels Using Sulfonated Organic Polymers
(2019) RSC Green Chemistry, 2019-January (61), pp. 79-114
<https://doi.org/10.1039/9781788016131-00079>

Ferlin, F., Van Der Hulst, M.K., Santoro, S., Lanari, D., Vaccaro, L.
Continuous flow/waste-minimized synthesis of benzoxazoles catalysed by heterogeneous manganese systems
(2019) Green Chemistry, 21 (19), pp. 5298-5305
<https://doi.org/10.1039/c9gc01641d>

Ferlin, F., Cappelletti, M., Vivani, R., Pica, M., Piermatti, O., Vaccaro, L.
Auzirconium-phosphonate nanoparticles as an effective catalytic system for the chemoselective and switchable reduction of nitroarenes
(2019) Green Chemistry, 21 (3), pp. 614-626
<https://doi.org/10.1039/c8gc03513j>

Ferlin, F., Luciani, L., Viteritti, O., Brunori, F., Piermatti, O., Santoro, S., Vaccaro, L.
Polarclean as a sustainable reaction medium for the waste minimized synthesis of heterocyclic compounds
(2019) Frontiers in Chemistry, 7 (JAN), art. no. 659
<https://doi.org/10.3389/fchem.2018.00659>

Mahmoudi, H., Valentini, F., Ferlin, F., Bivona, L.A., Anastasiou, I., Fusaro, L., Aprile, C., Marrocchi, A., Vaccaro, L.
A tailored polymeric cationic tag-anionic Pd(ii) complex as a catalyst for the low-leaching Heck-Mizoroki coupling in flow and in biomass-derived GVL
(2019) Green Chemistry, 21 (2), pp. 355-360
<https://doi.org/10.1039/c8gc03228a>

Marrocchi, A., Trombettoni, V., Sciosci, D., Campana, F., Vaccaro, L.
Key trends in sustainable approaches to the synthesis of semiconducting polymers, invited chapter in: Handbook of Organic Materials for Electronic and Photonic Devices
O. Ostroverkhova, Elsevier (2019). ISBN 978-0-08-102284-9

<https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102284-9.00002-4>

Trombettoni, V., Campana, F., Marrocchi, A., Vaccaro, L.

Sustainable batch or continuous-flow preparation of biomass derived fuels using sulfonated organic polymers, in: Green Synthetic Processes and Procedures

Editor: R. Ballini, RSC, 2019, ISBN:978-1-78801-512-7

<https://doi.org/10.1039/9781788016131-00079>

G Zampini, D Matino, G Quaglia, L Tarpani, M Gargaro, F Cecchetti, A. Iorio, F. Fallarino, L. Latterini Experimental evidences on the role of silica nanoparticles surface morphology on the loading, release and activity of three proteins Microp. Mesop. Mater. 2019, 287, 220-227

C Aguzzi, A Donnadio, G Quaglia, L Latterini, C Viseras, V Ambrogi Halloysite-Doped Zinc Oxide for Enhanced Sunscreening Performance ACS Applied Nano Materials 2019, 2 (10), 6575-6584

M Gambucci, C Cerretani, L Latterini, T Vosch The effect of pH and ionic strength on the fluorescence properties of a red emissive DNA-stabilized silver nanocluster, Methods and Applications in Fluorescence 2019 8 (1), 014005

L. Ferrero, C. Ritter, D. Cappelletti, B. Moroni, G. Močnik, M. Mazzola, A. Lupi, S. Becagli, R. Traversi, M. Cataldi, R. Neuber, V. Vitale, E. Bolzacchini

Aerosol optical properties in the Arctic: The role of aerosol chemistry and dust composition in a closure experiment between Lidar and tethered balloon vertical profiles

Science of The Total Environment, 686, 452-467 (2019)

<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.05.399>

B. Moroni, S. Crocchianti, C. Petroselli, R. Selvaggi, S. Becagli, R. Traversi and D. Cappelletti

Potential source contribution function analysis of long-range transported aerosols in the Central Mediterranean: a comparative study of two background sites in Italy

Rend. Fis. Acc. Lincei, 30, 337-349 (2019)

<https://doi.org/10.1007/s12210-019-00792-x>

LP Maffei, C Cavallotti, A Caracciolo, Nadia Balucani, P Casavecchia

Rate rules for the reactions of oxygen atoms with terminal alkenes

Fuel, 116536, <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116536>

Adriana Caracciolo, Gianmarco Vanuzzo, Nadia Balucani, Domenico Stranges, Piergiorgio Casavecchia, Luna Pratali Maffei, Carlo Cavallotti

Combined Experimental and Theoretical Studies of the O(3P) + 1-Butene Reaction Dynamics: Primary Products, Branching Fractions, and Role of Intersystem Crossing

Journal of Physical Chemistry A, 123 (2019) 9934-9956,

A. Caracciolo, G. Vanuzzo, P. Recio, Nadia Balucani, P. Casavecchia

Molecular beam studies of elementary reactions relevant in plasma/ combustion chemistry: O(3 P)+unsaturated hydrocarbons

Rendiconti Lincei. Scienze Fisiche e Naturali, 30 (2019) 549;

M. Rosi, D. Skouteris, Nadia Balucani, C. Nappi, N. Faginas Lago, L. Pacifici, S. Falcinelli, D. Stranges

An experimental and theoretical investigation of 1-butanol pyrolysis

Frontiers in Chemistry, 7 (2019) 326;

Adriana Caracciolo, Gianmarco Vanuzzo, Nadia Balucani, Domenico Stranges, Silvia Tanteri, Carlo Cavallotti, Piergiorgio Casavecchia

Crossed molecular beams and theoretical studies of the O(3P) + 1,2-butadiene reaction: Dominant formation of propene + CO and ethylidene + ketene molecular channels

Chinese Journal of Chemical Physics, 32 (2019) 113;

S. Battaglia, S. Evangelisti, Thierry Leininger, F. Pirani, N. Faginas Lago

A novel intermolecular potential to describe the interaction between the azide anion and carbon nanotubes

Diamond & Related Materials, (2019)

J. Vekeman, JoséSaánchez-Marín, A. Sánchez de Merás, I. Garcia Cuesta, , N. Faginas Lago

Flexibility in the Graphene Sheet: The Influence on Gas Adsorption from Molecular Dynamics Studies

Journal of Physical Chemistry C 123, 28035-28047(2019)

Andrea Lombardi, Noelia Faginas-Lago, and Vincenzo Aquilanti

The Invariance Approach to Structure and Dynamics: Classical Hyperspherical Coordinates

In: Misra S. et al. (eds) Computational Science and Its Applications - ICCSA 2019. ICCSA 2019. Lecture Notes in Computer Science, vol 11621, 306-315 (2019)

Noelia Faginas-Lago, Yusuf Bramastya Apriliyanto, Andrea Lombardi

Molecular Simulations of CO₂/N₂/H₂O Gaseous Mixture Separation in Graphyne Membrane

In: Gervasi O. et al. (eds) Computational Science and Its Applications - ICCSA 2019. ICCSA 2019. Lecture Notes in Computer Science 11624, 1-14 (2019)

J. Vekeman, N. Faginas Lago, A. Lombardi, A. Sánchez de Merás, I. Garcia cuesta, M. Rosi

Molecular dynamics of CH₄/N₂ mixtures on a flexible graphene layer: adsorption and selectivity case study

Frontiers in Chemistry, section Physical Chemistry and Chemical Physics 7, 386 (2019)

A. Lombardi, F. Pirani, M. Bartolomei, C. Coletti, A. Laganà,

A full dimensional potential energy function and the calculation of the state-specific properties of the CO+N inelastic processes within an Open Molecular Science Cloud Perspective,

Front. Chem. 7, 309 (2019)

QUADRO D.6

D.6 Premialità

Descrizione azioni realizzate nel 2019

La progettazione delle azioni di premialità è proseguita e si è definita nel 2019.

Le prime attività programmate inizieranno nel 2020

QUADRO D.7

D.7 Attività didattiche di elevata qualificazione

Descrizione azioni realizzate nel 2019

In accordo con il programma, nel 2019 sono state attivate ulteriori 3 borse di Dottorato in Scienze Chimiche a valere sul budget del progetto AMIS, (XXXV ciclo). In particolare.

Chiara Domestici - lab IC2E - Iridium-based Molecular and Material Catalysts for Processes Related to the Production of Renewable Energy. Supervisor: Alceo Macchioni.

Letizia Mencaroni - lab Photochem - Singlet fission under the gaze of fast and ultrafast spectroscopy: a new interesting mechanism for triplet production. Supervisor: F. Ortica. Co-tutor: A. Spalletti.

Diego Sorbelli - lab TheoEn - Relativistic theoretical approaches for the catalytic and optical properties of heavy elements' molecular compounds. Supervisor: L. Belpassi. Co-tutor P. Belanzoni.

QUADRO D.8

D.8 Modalità e fasi del monitoraggio

Descrizione attività di monitoraggio realizzate nel 2019 e relativi esiti

Il monitoraggio nel secondo anno di progetto si è svolto con regolari riunioni del Comitato di Gestione, riunioni con i PI dei laboratori e discussioni in Consiglio di Dipartimento.

QUADRO D.9

D.9 Strategie per la sostenibilità del progetto

Si utilizzano le informazioni fornite in sede di candidatura, il campo non è modificabile

Sezione E - Budget per la realizzazione del progetto

QUADRO E.1

E.1 Reclutamento di personale

Reclutamento del personale al 31 dicembre 2019

Come anticipato con nota del 4 febbraio 2020 n. 1522, è estratto dalla banca dati DALIA e riportato nella successiva tabella tutto il reclutamento del personale a valere sul Budget MIUR - Dipartimenti di Eccellenza e su eventuale co-finanziamento dell'Ateneo o di terzi ad esso associato, a partire dal 1 gennaio 2019 (codice "45 - Reclutamento- Dip. di eccellenza 2018-2022"). Il Dipartimento dovrà verificare la coerenza di quanto riportato con le precedenti trasmissioni avvenute su DALIA e provvedere all'inserimento delle informazioni relative alla spesa sostenuta per il reclutamento di assegnisti di ricerca, Personale tecnico amministrativo a tempo determinato, tecnologi, collaborazioni a progetto motivando nel quadro D.4 gli scostamenti superiori al 10% tra la spesa totale per gli assegni di ricerca così come calcolata attraverso le informazioni di DALIA e quella inserita nella tabella E.1. Saranno considerati definitivi ai fini del monitoraggio i dati relativi al personale che ha preso servizio dal 1 gennaio al 31 dicembre 2019 ed inviati correttamente a Dalia. Le informazioni inserite saranno confrontate con quanto inserito in sede di presentazione del progetto. Gli eventuali scostamenti rispetto al reclutamento previsto, consentiti se coerenti con gli obiettivi di sviluppo inseriti

nel progetto e nell'ambito di quanto precedentemente comunicato dal Ministero con la nota del 11 luglio 2017, n. 8414 e con la nota del 27 settembre 2017, n. 11220, dovranno essere adeguatamente motivati nel quadro D.4, sia con riferimento alle ragioni dello scostamento sia con riferimento alla coerenza con gli obiettivi di sviluppo previsti. Sono inseriti controlli automatici vincolanti per l'inserimento delle informazioni relative ai punti organico e alle risorse impiegate (in rosso) e non vincolanti per la segnalazione degli eventuali scostamenti (in blu).

Tipologia	PUNTI ORGANICO IMPIEGATI (numero)	RISORSE IMPIEGATE (€)				RECLUTAMENTO		
	Valore complessivo	Valore complessivo	Valore su "Budget MIUR - Dipartimenti di Eccellenza"	Valore su risorse di Ateneo	Valore su risorse di terzi	Numero di unità di personale reclutate	Categoria di personale	Aree CUN, macro settore, settore concorsuale e SSD di riferimento
a. Professori esterni all'ateneo di I fascia	0,00	0	0	0	0	0		
b. Professori esterni all'ateneo di II fascia	0,00	0	0	0	0	0		
c. Ricercatori art. 24, c. 3, lett. b), Legge 240/2010 (compreso passaggio II fascia)	0,00	0	0	0	0	0		
d. Altro Personale tempo indeterminato	0,00	0	0	0	0	0		
e. Altro personale tempo determinato (ricercatori di tipo A, Assegnisti di ricerca, Personale TA)								
e1. Ricercatori art. 24, c. 3, lett. a), Legge 240/2010		0	0	0	0	0		
e2. Assegni di ricerca		0	0	0	0	0		
e3. Personale TA a tempo determinato		0	0	0	0	0		
e4. Tecnologi		0	0	0	0	0		
e5. Collaborazioni a progetto		0	0	0	0	0		
Totale	0,00	0	0	0	0	0		

Nei casi in cui, come previsto dalle FAQ trasmesse con nota 11220/2017, il costo sostenuto per gli assegni di ricerca non sia da considerare come costo per il reclutamento (quadro E.1) e sia da includere tra quelli relativi alle attività didattiche di elevata qualificazione (quadro E.2), si chiede agli Atenei di segnalare all'Ufficio (dgfis.ufficio2@miur.it) e a CINECA (sua.rd@cineca.it) quali beneficiari di assegni di ricerca sono a carico delle attività didattiche. Successivamente, si provvederà a eliminare tali assegni dal quadro E.1 e renderli disponibili

in visualizzazione nel quadro E.2. Al fine di completare la rendicontazione, il Dipartimento dovrà inserire tali costi nei campi a disposizione per le attività didattiche e di elevata qualificazione insieme agli altri costi sostenuti per la medesima azione

QUADRO E.2 | E.2 Infrastrutture, premialita' al personale, attività didattiche di elevata qualificazione

Risorse impiegate al 31 dicembre 2019

Oggetto	€ impiegati a valere sul budget MIUR - Dipartimenti di Eccellenza al 31 dicembre 2019	€ impiegati a valere su risorse proprie o di terzi aventi carattere di certezza al 31 dicembre 2019	TOTALE € impiegati per ciascuna azione
Infrastrutture ¹	1.624.267	0	1.624.267
Premialità Personale ²	0	0	0
Attività didattiche di alta qualificazione ³	178.807	0	178.807
Totale	1.803.074	0	1.803.074

¹ Il campo include il costo totale dell'intervento per il quale sia stato concluso l'acquisto ovvero pubblicato il bando di gara.

² Il campo include sia le risorse già spese che quelle per le quali è possibile individuare il beneficiario. Si ricorda che, non trattandosi di progetti di ricerca o finanziamenti assimilabili al conto terzi, non sono ammissibili quote di prelievo a favore del bilancio dell'Ateneo o degli Uffici centrali di supporto per la copertura di eventuali costi indiretti.

³ Il campo include il costo totale dell'intervento per il quale sia stato concluso l'acquisto ovvero pubblicato il bando di gara e, nei casi di interventi a favore di singoli beneficiari, il campo include quelli per i quali è possibile individuare il beneficiario. Nel caso di borse di dottorato e di assegni di ricerca erogati ai sensi del dm 45/2013, come già comunicato, occorre inserire il valore totale (triennale o quadriennale) del contributo assegnato, così come determinato dal d.m. del 25 gennaio 2018, n. 40, ivi inclusa la maggiorazione per la mobilità internazionale e la quota del 10% per le attività di ricerca.

Gli eventuali scostamenti rispetto alle spese previste per infrastrutture, premialità e attività didattiche di elevata qualificazione, consentite se coerenti con gli obiettivi di sviluppo inseriti nel progetto e nell'ambito di quanto precedentemente comunicato dal Ministero con la nota del 11 luglio 2017, n. 8414 e con la nota del 27 settembre 2017, n. 11220, dovranno essere riportate rispettivamente nei quadri D.5, D.6 e D.7 e adeguatamente motivati, sia con riferimento alle ragioni dello scostamento sia con riferimento alla coerenza con gli obiettivi di sviluppo previsti. Sono inseriti controlli automatici non vincolanti per la segnalazione degli eventuali scostamenti (in blu).

QUADRO E.3 | E.3 Sintesi

Importo annuale accordato: 1.731.295€

Oggetto	Budget (€)			Risorse (€) impiegate al 31 dicembre 2019		
	Complessivo	Dip. eccellenza	Risorse proprie o di terzi	Totali	A valere sul budget MIUR - Dipartimenti	A valere su risorse proprie o di terzi aventi carattere di

					di Eccellenza	certezza
Professori esterni all'ateneo	1.710.000	1.710.000	0	0	0	0
Ricercatori art. 24, c. 3, lett. b), Legge 240/2010	2.223.000	2.223.000	0	0	0	0
Altro Personale	2.052.000	1.282.500	769.500	0	0	0
Subtotale	5.985.000	5.215.500	769.500	0	0	0
Infrastrutture	4.555.729	2.805.729	1.750.000	1.624.267	1.624.267	0
Premialità Personale	200.000	200.000	0	0	0	0
Attività didattiche di alta qualificazione	488.771	453.771	35.000	178.807	178.807	0
Totale	11.229.500	8.675.000	2.554.500	1.803.074	1.803.074	0