

Dipartimento di Chimica



Dipartimento di Chimica



Personale

oggi 4/11

7	6	Full Professors
33	35	Associate Professors
30	25	Researchers (RTI, RTDB, RTDA)
24	24	Postdoc
46	46	PhD student
27	27	Technicians and administration personnel

DIDATTICA

L. Triennali

Chimica
Chimica Industriale

L. Magistrali

Chimica
Chimica Industriale
Chimica Analitica

Dottorato

Sc. Chimiche

Master II Livello

Caratt. e tecnologie per la bonifica dei siti Inquinati
Metodologie analitiche forensi
Sostanze organiche naturali

About 2000 students

Il rapporto con il territorio



Progetti di Terza Missione

- Lab2Go Chimica
- Piano Lauree Scientifiche (MIUR)
- Dov'è la Chimica? (Roma Capitale)

Laboratorio di divulgazione

- Lab zio Tungsteno



I numeri del Dipartimento di Chimica

Convenzioni con Enti di Ricerca attive

- 3 Centro di Ricerca
 - Centro di ricerca per le scienze applicate alla protezione dell'ambiente e dei Beni Culturali (CIABC) - direttore: Mauro Majone
 - Centro di Ricerca per le nanotecnologie applicate all'ingegneria (CNIS) - direttore: Antonio d'Alessandro
 - Centro High Tech Recycling (HTR) - direttrice: prof.ssa Francesca Pagnanelli
- 3 Istituti CNR
 - Istituto per i Sistemi Biologici
 - Istituto di Metodologie Chimiche
 - Istituto per lo Studio di Materiali Nanostrutturati26 ricercatori
- INAIL
3 ricercatrici

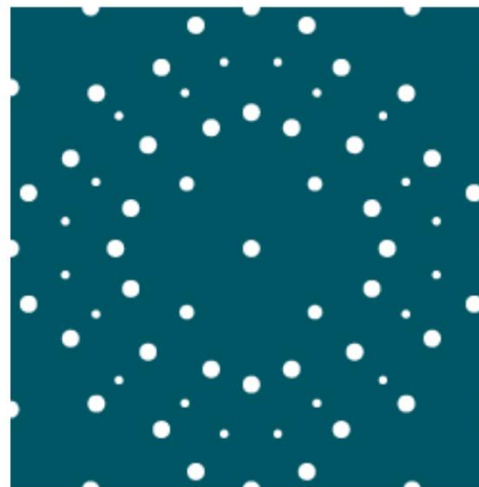
STRUMENTAZIONE DI DIPARTIMENTO

<https://www.chem.uniroma1.it/ricerca/attrezzature-e-strumentazione>

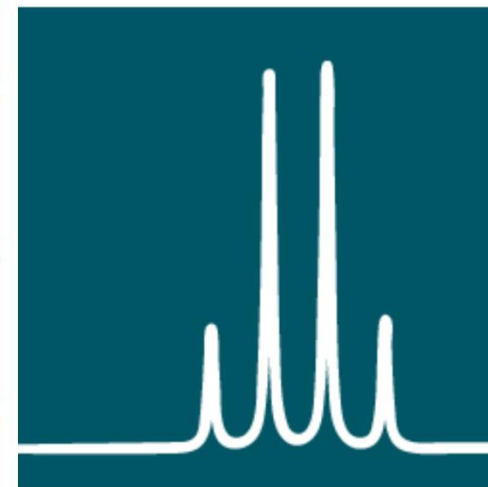
I laboratori scientifici del Dipartimento di Chimica mettono a disposizione del proprio personale di ricerca strumentazioni scientifiche avanzate o di uso particolarmente diffuso



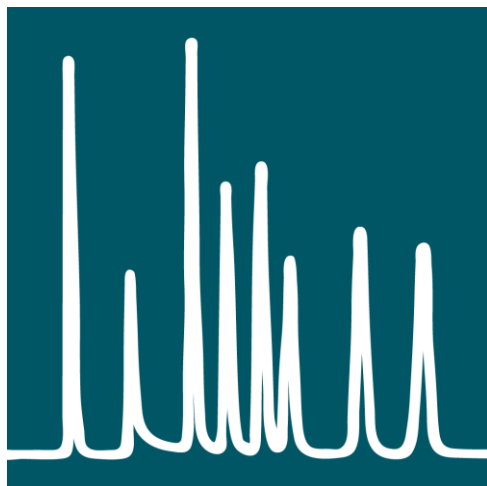
Analisi Elementare
Prof.ssa Donzello



Diffrazione R.X.
Prof. Portalone



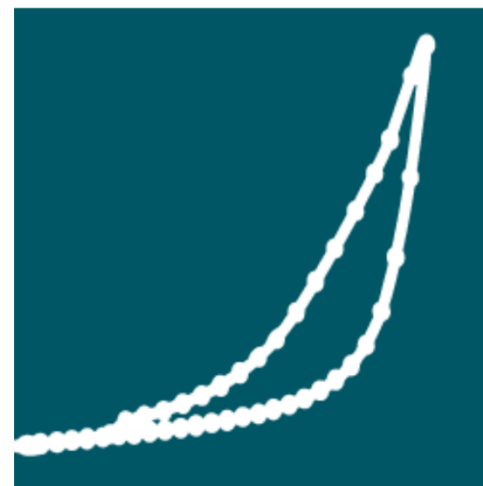
NMR
Prof.ssa Di Cocco



MALDI-TOF
Prof. Laganà



XPS
Prof. Zanoni



Porosimetria
Dott.ssa Pettiti



Raman
Dott.ssa
Pietrogiacomini

STRUMENTAZIONE DI ATENEIO RECENTI



SAXSLAB

Small Angle X-Ray Scattering (SAXS)

Wide Angle X-ray Scattering (WAXS)

Grazing Incidence Small Angle Scattering (GISAXS)

<https://www.chem.uniroma1.it/ricerca/saxlab>



CLUSTER PER IL CALCOLO SCIENTIFICO - 6DOT

Hardware

La piattaforma dispone di 4 nodi di calcolo, con la seguente configurazione:

•N. 2 Intel SKL-SP 4116 12C 2.1GHz ; N. 4 16GB DDR4; N. 2 NVIDIA Geforce GTX 1080Ti

I calcoli sono gestiti con un sistema di code basato su Torque/Maui che ottimizza

Software

I pacchetti di sviluppo sono: gcc, g++, gfortran; intel/13.1.1; pgc/16.1; openmpi/gcc; openmpi/icc

Gli applicativi sono: Gromacs; Gaussian 09

Tutti gli utenti possono comunque installare i programmi di cui necessitano nelle rispettive aree home.

<https://www.chem.uniroma1.it/ricerca/cluster-per-il-calcolo-scientifico>

Department of Chemistry



DIVISIONS:

Analitical Chemistry (CHIM/01)

Physical Chemistry (CHIM/02)

Inorganic Chemistry (CHIM/03)

Industrial Chemistry (CHIM/04; ING-IND25; ING-IND26)

Organic Chemistry (CHIM/06)

Method development
for analysis in
environmental samples
and **work environments**

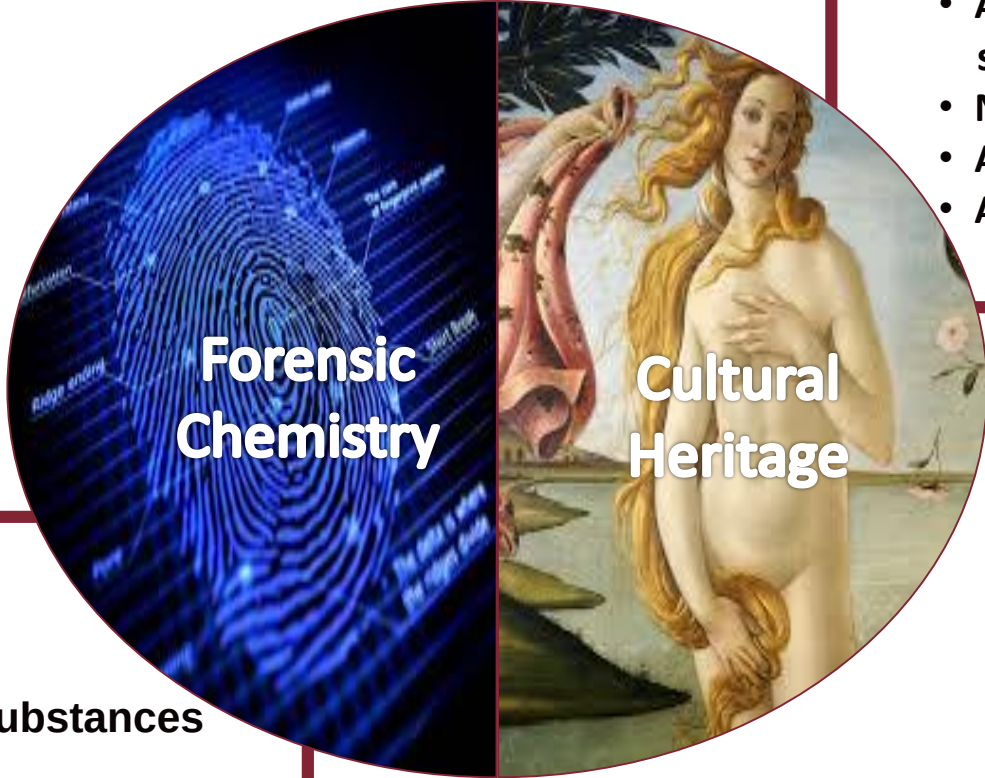
- ❖ Analysis of metals and emerging contaminants in water and soil
- ❖ Analysis of particulates, bioaerosol and air quality
- ❖ Li-ion battery emissions during combustion

Method development
for **food quality** and **safety**

- ❖ Analysis of drugs, mycotoxins, estrogens, pesticides
 - ❖ Identification of bioactive compounds (polyphenols, peptides, vitamins, carotenoids, etc...)
 - ❖ Characterization of nutraceuticals and waste valorization: Proteomics, Peptidomics, Metabolomics, Lipidomics
- 
- 

- Ultra-trace analysis in complex matrices;
- hyphenated and multi-hyphenated analytical techniques: UHPLC/nanoHPLC, mass spectrometry;
- spectroscopy-chemometrics;
- miniaturization, green-chemistry.

Forensic Chemistry and Cultural Heritage



**Forensic
Chemistry**

- Illicit drug testing
- Explosives analysis
- New psychoactive substances
 - ✓ Metabolites-ID
 - ✓ HRMS screening

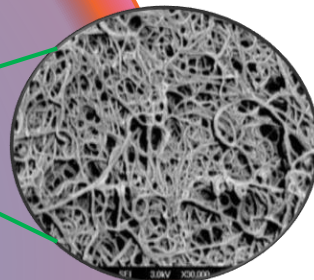
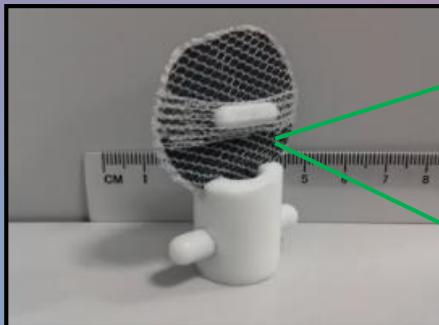
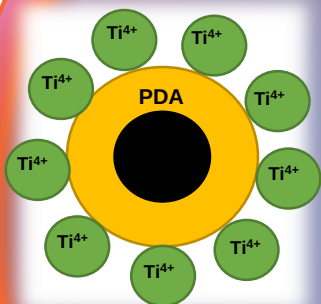
**Cultural
Heritage**

- Analysis of natural and synthetic organic dyes
- Nanomaterials development
- Analysis of ligands
- Analysis of plastic materials

Sample preparation and reaserch fields in analytical chemistry

Development of *Solid-Phase Extraction materials and devices*:

- buckypaper
- Nanocomposite materials
- Magnetic materials
- Molecularly imprinted polymers



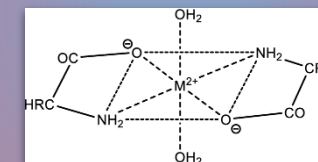
Preparation, characterization and application of neoteric solvents:

- Coline chloride-based eutectic liquids

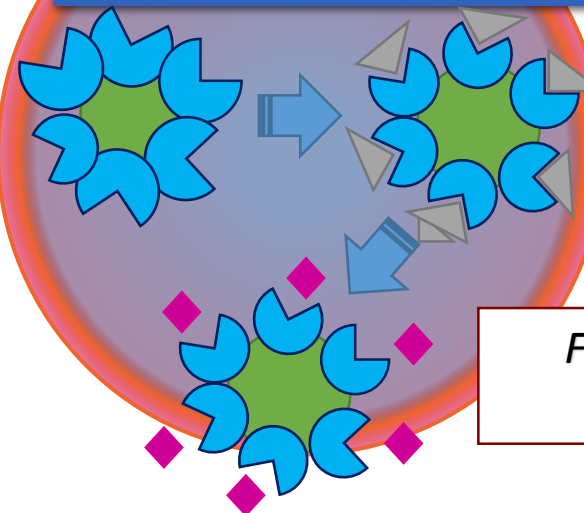


For Environmental, food and clinical applications

Thermodynamics of metal complexes and equilibria in solution



Immobilized enzymes as biocatalysts



For Environmental and food applications

Chimica Industriale

Raggruppamento costituito da ricercatori e professori appartenenti a tre SSD:

- CHIM/04 (Chimica Industriale)
- ING-IND/25 (Impianti Chimici)
- ING-IND/26 (Teoria dello Sviluppo dei Processi Chimici)

**Principali
aree
tematiche**

Sintesi e caratterizzazione di macromolecole

Nuovi materiali nanostrutturati

Valorizzazione di substrati di scarto

Trattamento di matrici ambientali inquinate

Sintesi e caratterizzazione di macromolecole

- ✓ (Bio)materiali emocompatibili, antimicrobici ed antiossidanti (*A. Piozzi, I. Francolini*)
- ✓ Copolimeri multi-stimolo sensibili (*G. Masci*)
- ✓ Sviluppo di superfici polimeriche antifouling (*A. Piozzi, I. Francolini*)
- ✓ Preparazione di scaffolds per l'ingegneria tissutale (*A. Martinelli, A. Barbetta*)
- ✓ Metodologie avanzate di caratterizzazione spettroscopica IR di transizioni termiche di polimeri (*A. Martinelli*)

Nuovi materiali nanostrutturati

- ✓ Idrogeli petidici e materiali polimerici nanostrutturati per applicazioni di drug-delivery (*C. Palocci, A. Piozzi, I. Francolini*)
- ✓ Nanomateriali ibridi bioispirati (*G. Masci*)
- ✓ Colloidi compositi (*G. Masci*)
- ✓ Tecnologie microfluidiche per la nanofabbricazione di biopolimeri (*C. Palocci*)
- ✓ Sviluppo di biomateriali mediante microfluidica e stampa 3D (*A. Barbetta*)
- ✓ Sintesi di elettrodi nanostrutturati per dispositivi di accumulo di energia (*F. Pagnanelli, P. Altimari*)

Applicazioni in campo medico e biotecnologico

Valorizzazione di substrati di scarto

- ✓ Produzione di *fine chemicals* mediante microalghe (F. Pagnanelli, P. Altimari)
- ✓ Produzione di biocombustibili e prodotti chimici mediante processi bioelettrochimici (M. Majone, M. Villano)
- ✓ Produzione di poliidrossialcanoati con colture microbiche miste (M. Majone, F. Valentino, M. Villano)
- ✓ Impiego di *green solvents* per il recupero di biopolimeri (C. Palocci)

Trattamento di matrici ambientali inquinate

- ✓ Bonifica sostenibile di acque di falda contaminate (M. Petrangeli Papini, M. Majone)
- ✓ Processi di biorisanamento elettricamente assistiti (M. Majone, M. Petrangeli Papini)
- ✓ Processi idrometallurgici per il trattamento di rifiuti tecnologici (F. Pagnanelli)
- ✓ Rimozione di metalli pesanti da soluzioni acquose mediante bioadsorbimento (F. Pagnanelli, P. Altimari)

Applicazioni per la salvaguardia ambientale e l'implementazione di una economia circolare

Il rapporto con il territorio



Contratti di ricerca

€ 920.000

l'ammontare dei contratti in conto terzi attivati nel 2017-2018

- € 415.000 con Syndial Servizi di bonifica ambientale (ENI)
- € 65.000 con il progetto INNOPAQ nell'ambito del POR FESR Abruzzo 2014/2020
- ...

Progetti Europei

Objective: the overall objective of the project is to integrate into a single facility and to use one main technology chain for the conversion of several types of urban bio-wastes into valuable bio-based products, while also minimizing any residual or consequent waste to be disposed of.

Coordinator: Prof. Mauro Majone (Head) - University of Rome "La Sapienza"

EU Funding (Grant Agreement 730349): around 3 millions euro

Duration: 3 years

Start: 1st January 2017



urban biowaste becomes bioplastic



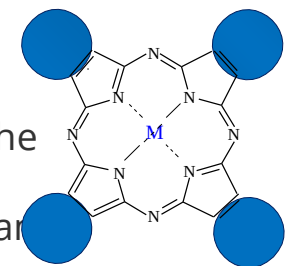
Keywords: biodegradable, food packaging, by-products, composite, sustainable, safety, quality, PHA

Chimica Generale

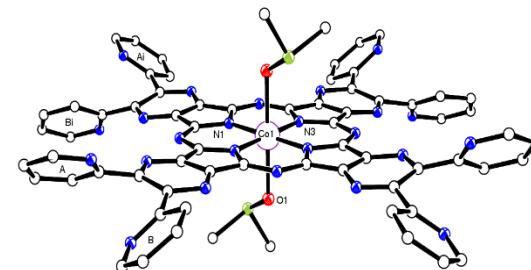
Maria Pia Donzello, Elisa Viola, Noemi Bellucci

Macroциcli Porfiraziniци: Sintesi, Caratterizzazione e Potenziali Applicazioni in Campo Biochimico/Biomedico

Progettazione, sintesi, caratterizzazione chimico-fisica e studio delle proprietà fotofisiche e fotochimiche di nuove classi di macroциcli porfiraziniци, mono e multimetallici, aventi innovative caratteristiche strutturali che conferiscono potenzialità per applicazioni in campo biochimico. Per alcune delle classi di macroциcli è stata provata la loro attività come fotosensibilizzatori nella terapia fotodinamica (PDT) e come potenziali agenti anticancerogeni ad azione multimodale.



Anelli eterociclici di diverse dimensioni

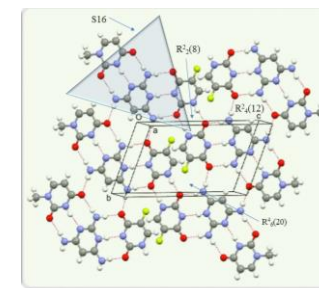


[Py₈TPyzPzCo(DMSO)₂]

Gustavo Portalone

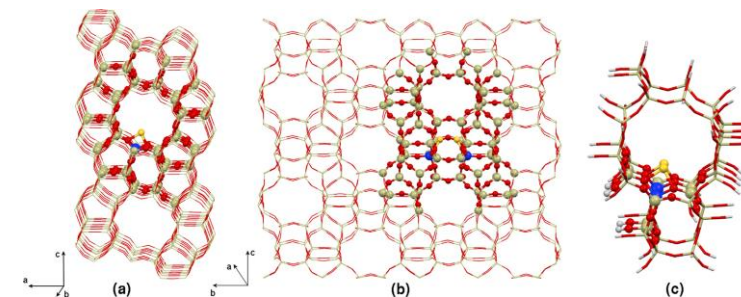
Multi-component crystals of nucleobases: synthesis and structural determination

The solid-state synthesis of multi-component crystals is a formidable task, as their isolation is often unpredictable. The strategy is based on the exploitation of the different environments of any particular component in a cocrystal. Here it is shown the first known *ternary* (1:1:1) cocrystal formed by the insertion of 2,4,6-triaminopyrimidine between nucleobases 5-fluorouracil and 1-methyluracil.



Simone Morpurgo, Giuliano Moretti

Catalizzatori zeolitici per l'abbattimento di NOx: Studi sperimentali e computazionali



Delia Gazzoli, Ida Pettiti, Daniela Pietrogiacomì

Maria Cristina Campa, Giuseppe Fierro : CNR-ISMN c/o Dipartimento di Chimica

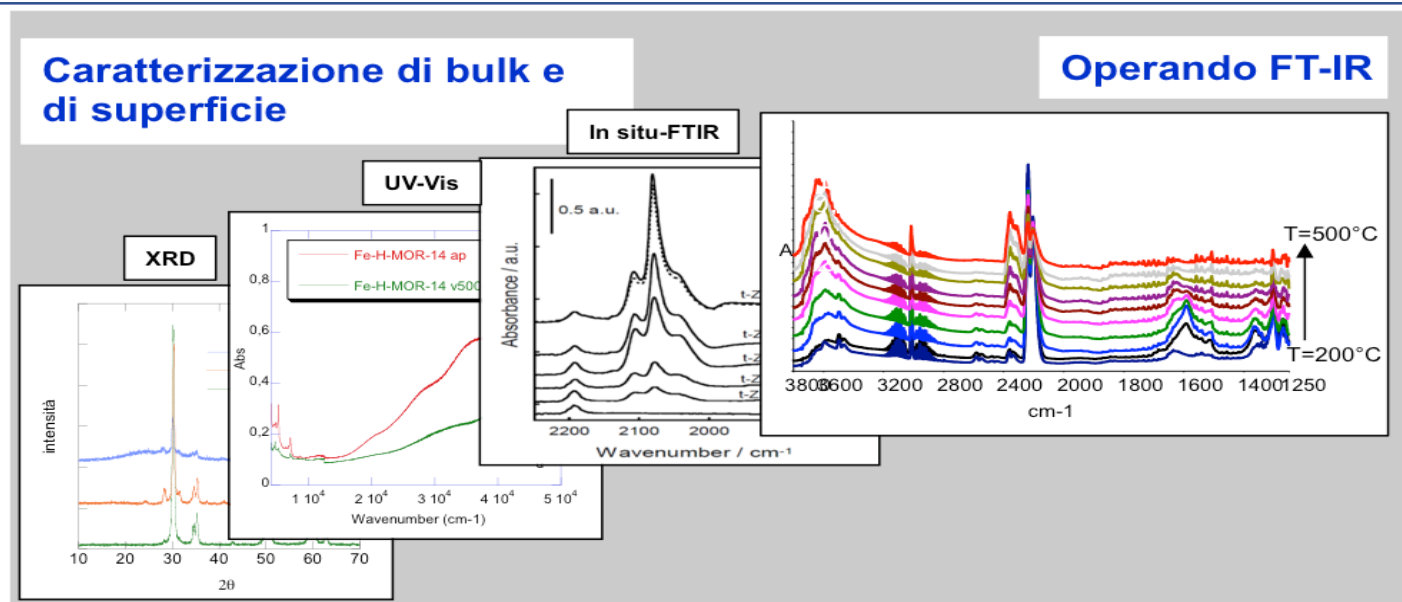
Leandro Ardemani, Giulia Luccisano: Assegnisti

Ossidi e metalli nano-strutturati per processi ecosostenibili in catalisi eterogenea

Preparazione, caratterizzazione e studio dell'attività catalitica di sistemi a base di metalli di transizione supportati su ossidi o scambiati in zeoliti per:

- produzione di H_2 e syngas;
- abbattimento di inquinanti atmosferici (NO_x e N_2O).

Studio delle relazioni tra reattività e proprietà strutturali e morfologiche del supporto e delle specie supportate mediante XRD, fisi- e chemi-sorbimento di gas, cicli redox, spettroscopia UV-vis DRS, Raman, FTIR “in situ” e in “operando”.

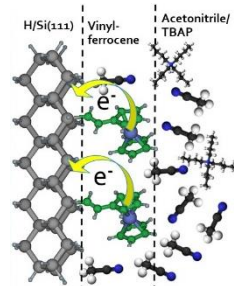


A.G. Marrani, V. Lanzilotto, R. Zaroni

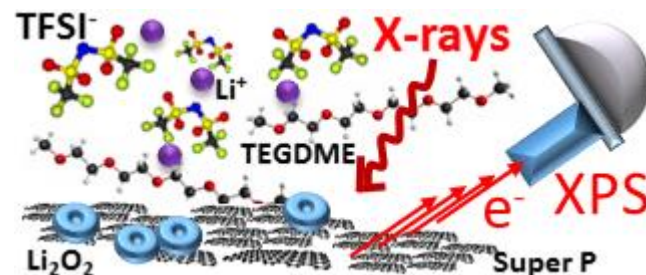
Scienza delle superfici applicata ad interfacce reattive

semiconduttore/molecole/elettrolita per applicazioni in dispositivi elettronici

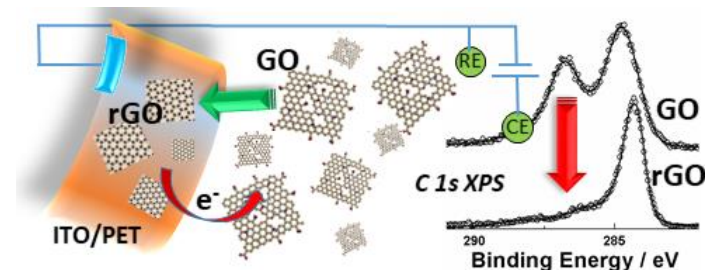
Caratterizzazione mediante fotoemissione (XPS, UPS) e fotoassorbimento (XAS), metodi elettrochimici, nanoscopie.



«Memorie» molecolari



Batterie Li-O₂



Interfacce Grafene/semiconduttore

Ilaria Fratoddi, Antonella Cartoni,

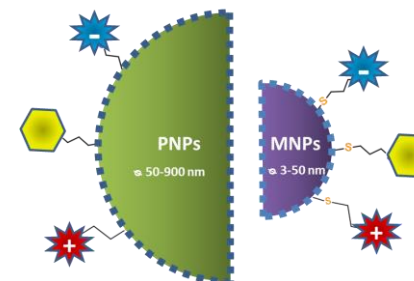
Sara Cerra, Raoul Fioravanti - PhD students

Materiali nanostrutturati

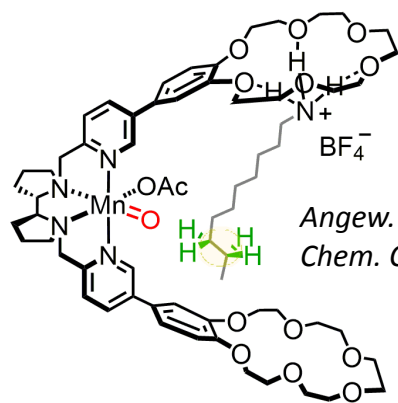
- 1) Sintesi nanoparticelle metalliche (MNPs, con M = Au, Ag, Pt, Pd) funzionalizzate con leganti tiolici
- 2) Sintesi materiali polimerici nanostrutturati (PNPs) sia organici che organometallici.

Caratterizzazione spettroscopica e morfologica.

Nanomateriali in optoelettronica, fotonica, sensoristica, biotecnologie, medicina, immobilizzazione di farmaci.



Fe and Mn based supramolecular catalysts for selective C-H oxidations

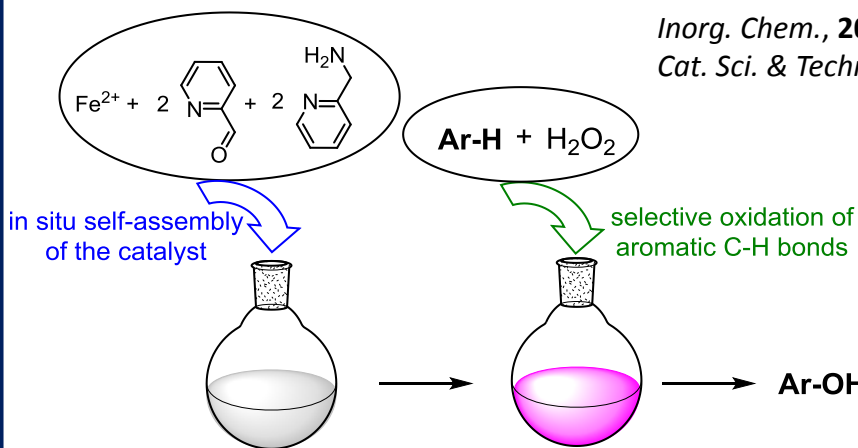


Angew. Chem. Int. Ed., **2017**, 56, 16347–16351
Chem. Commun., **2019**, 55, 917-920

Predictable C8-C9
 oxidation of linear amines

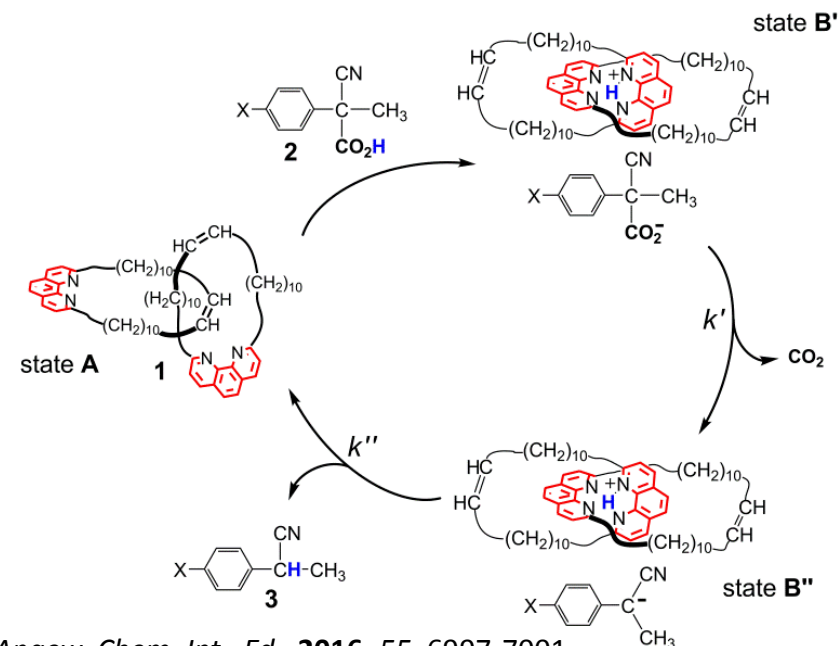
Alessia Barbieri
 Chiara Biagini
 Giorgio Capocasa
 Stefano Di Stefano
 Osvaldo Lanzalunga
 Andrea Lapi
 Barbara Ticconi

Self-assembled catalysts for functionalizations of hydrocarbons



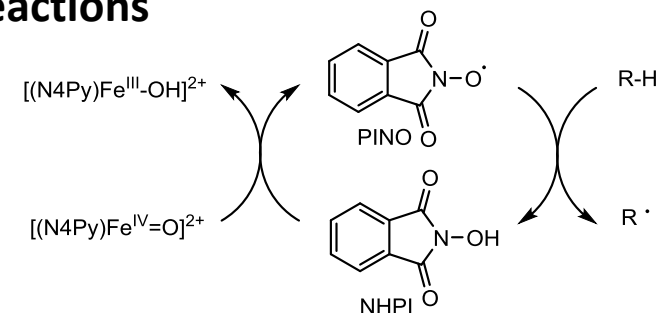
Inorg. Chem., **2015**, 54, 10141–10152
Cat. Sci. & Techn., **2017**, 7, 5677–5686

Chemical fuels for the operation of molecular machines



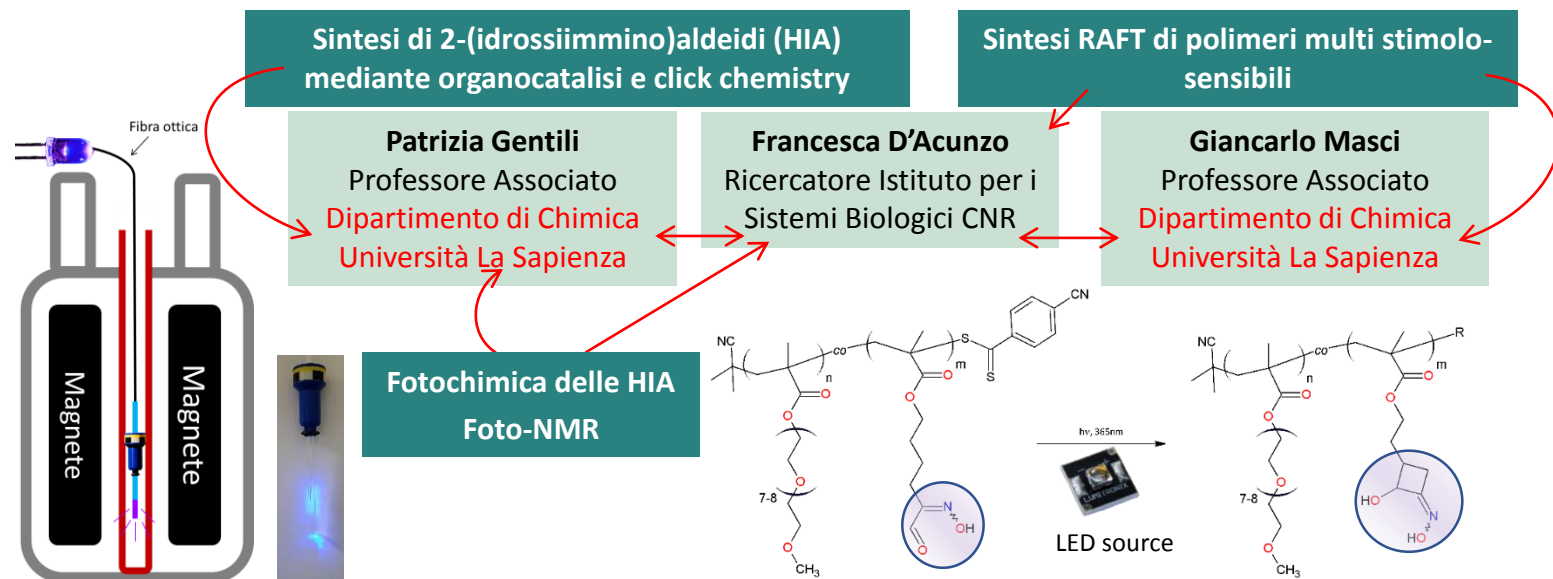
Angew. Chem. Int. Ed., **2016**, 55, 6997-7001
Angew. Chem. Int. Ed., **2019**, 58, 9876-9880

Use of radical mediators in oxidation reactions



J. Org. Chem., **2019**, ASAP DOI: 10.1021/acs.joc.9b01813
J. Org. Chem., **2019**, 84, Pages 1778-1786

Chimica Organica



Collaboratori 2015-2018

Dottorato: Martina Nardi

PostDoc: Polyssena Renzi (Gentili),
Serena De Santis (Masci)

Tesi di Laurea: Giampiero Proietti,
Mariangela Clemente, Alessandro Pinna,
Andrea Minelli, Irene Antignano, Paolo
Cambise, Ilaria Onori

Collaboratori 2019....

Dottorato: Irene Antignano

Tesi di Laurea: Dario Filippini, Davide
Arena, Laura Mancini, Francesca Gentile

Estrogenic derivatives as soft drugs to promote wound healing

Luisa Maria Migneco*, Francesca Ceccacci§, Francesca Leonelli°, Luigi Filocamo#

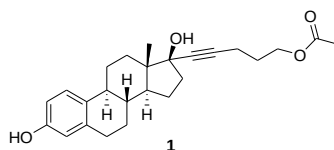
*Chemistry department §Institute of Biological Systems-CNR, support organizational unit, Sapienza University of Rome

°Environmental Biology department

#Biochemical Sciences Department, Sapienza University of Rome

Design, synthesis and formulation of estradiol derivatives of the type of **1** to act as soft drugs in accelerating wound healing processes.

Studies on liposomic formulations of estrogenic derivatives for local administration will be carried out in collaboration with Luciano Galantini (Chemistry department, Sapienza University of Rome).



Synthesis of bioactive diterpenes and derivatives

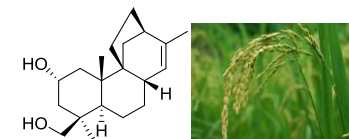
Francesca Leonelli°, Luisa M. Migneco*, Giulio Lucarelli*, Rinaldo Marini Bettolo*

°Environmental Biology department

*Chemistry department

Studies for the synthesis of stemaranic and stemodanic bioactive diterpenes. Total synthesis of (+)-Oryzalexin S (structure below), a stemaranic phytoalexin isolated from *Oryza sativa* plant (see below) when attacked by pathogens and never synthesized before, is in progress.

Biological tests on bioactivity will be carried out in collaboration with Alessio Valletta (Environmental Biology department, Sapienza University of Rome) and Istituto Superiore di Sanità.



COMPLESSI METALLO-SALOFEN IN CHIMICA SUPRAMOLECOLARE

Antonella Dalla Cort Dipartimento di Chimica

Paolo Mencarelli Dipartimento di Chimica

I complessi metallo-salofen, che si preparano in modo semplice a partire da materiali facilmente accessibili, sono degli strumenti versatili con interessanti applicazioni in chimica Supramolecolare.

Essi funzionano da recettori per il riconoscimento molecolare di specie neutre, di anioni e di coppie ioniche, sia in soluzione che allo stato solido, e come catalizzatori supramolecolari. Quando i ligandi salofenici vengono opportunamente funzionalizzati, i corrispondenti complessi metallici diventano solubili in acqua dove mantengono le loro proprietà di recettori molecolare.

a research group of Sapienza University of Rome, at the Department of Chemistry, coordinated by **Maria Assunta Navarra**

FOCUS: electrode and electrolyte materials for storage and conversion of energy in electrochemical devices (i.e., lithium-ion batteries and polymer electrolyte membrane fuel cells / electrolyzers)

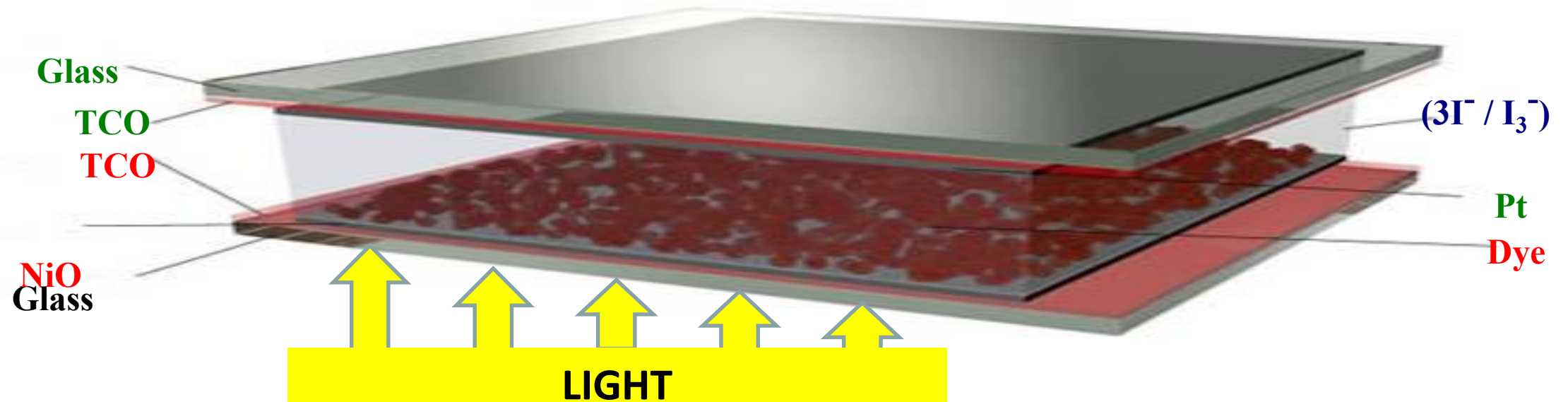


RECENT FUNDED PROJECTS:

- “Stabilizing the performance of high-voltage lithium Batteries by new generation composite Electrolytes” (BattEl), finanziato da **Sapienza** Università di Roma.
- “Solid State Batteries using Novel Composite Anodes”, finanziato da **Samsung** R&D Institute Japan.
- “Preparation and characterization of samples of gel polymer electrolytes with certain selected PVDF grades”, finanziato da **Solvay** Specialty Polymers Italy S.p.A.
- "Sintesi di ossidi misti come materiali catodici ad elevato potenziale redox" e "Elettroliti stabili ad alta tensione di lavoro", finanziati da **ENEA**, a valere sui fondi del Piano triennale della ricerca di sistema elettrico 2019-2021 del MiSE.

Analysis of the electrochemical and photoelectrochemical properties of p-type semiconducting metal oxides in the configuration of thin films and with nanostructured morphology for photoconversion applications

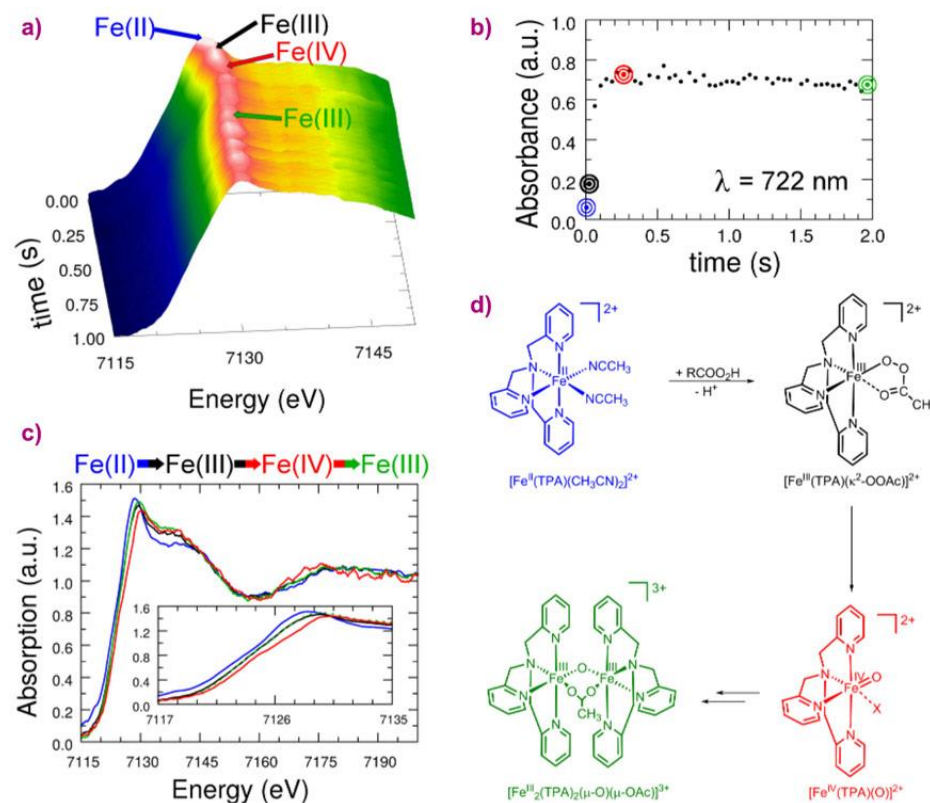
Danilo Dini - Laboratory of Photoelectrochemistry



Scheme of a transparent dye-sensitized solar cell for the photoelectrochemical generation of electrical energy

Study of chemical reactions in the millisecond timescale by coupled XAS and UV/Vis spectroscopy

The kinetic constants of fast bimolecular chemical reactions in solution have been determined for the first time by means of coupled energy-dispersive XAS carried out the ESRF Shyncotron Facility and UV/Vis spectroscopy. In the near future, structural characterisation of the short-lived reaction intermediates formed during the reactions will be possible from an analysis of the XANES spectra.

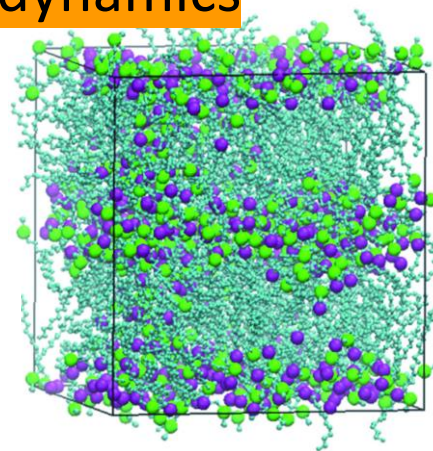
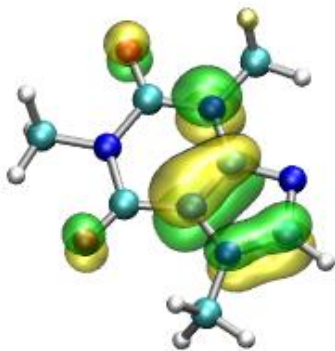


Modelling of Complex systems

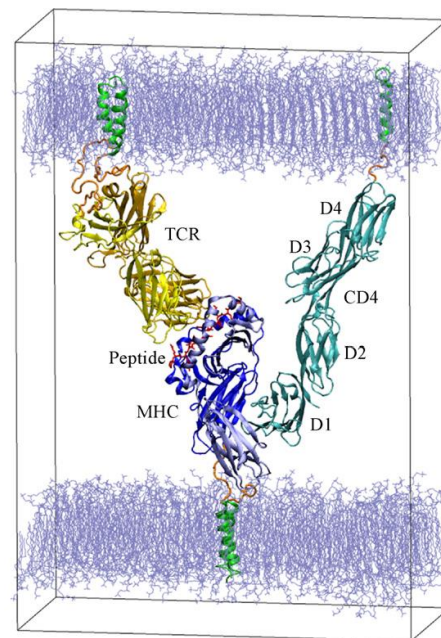
- Structures
- Spectroscopy
- Reactivity
- Thermodynamics

Relevant
TimeScale

Single Molecule



Liquids



Biological complexes

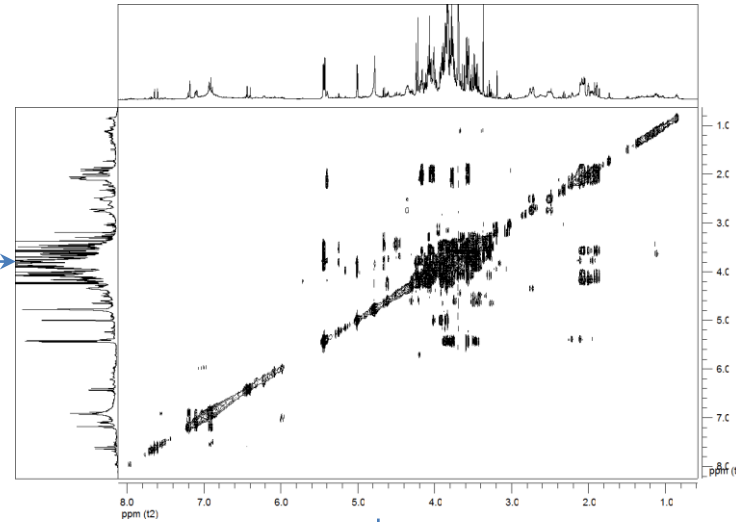
Complexity/
approximations

Matrices:

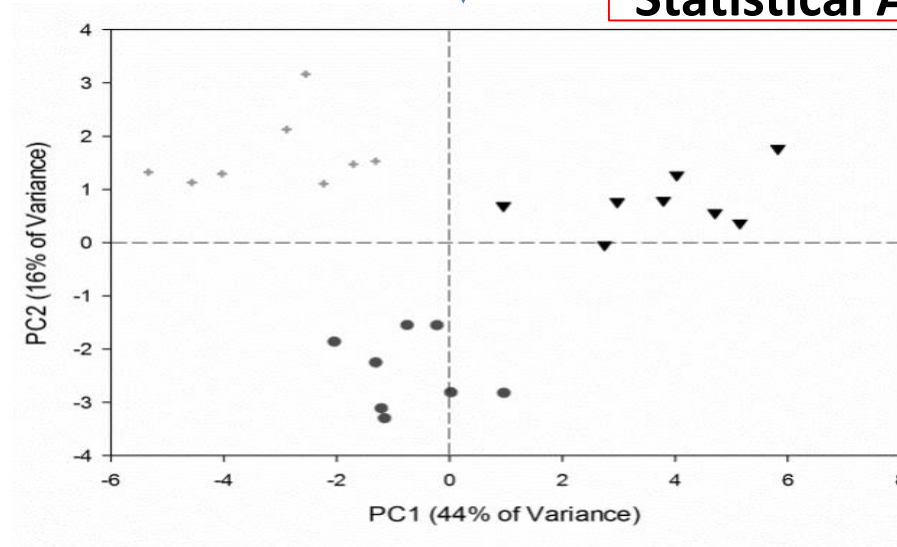
Foodstuff
Biological fluids
Plants
Cellular extracts.

Extraction procedures

NMR Analysis



Statistical Analysis



Definition of metabolic profile

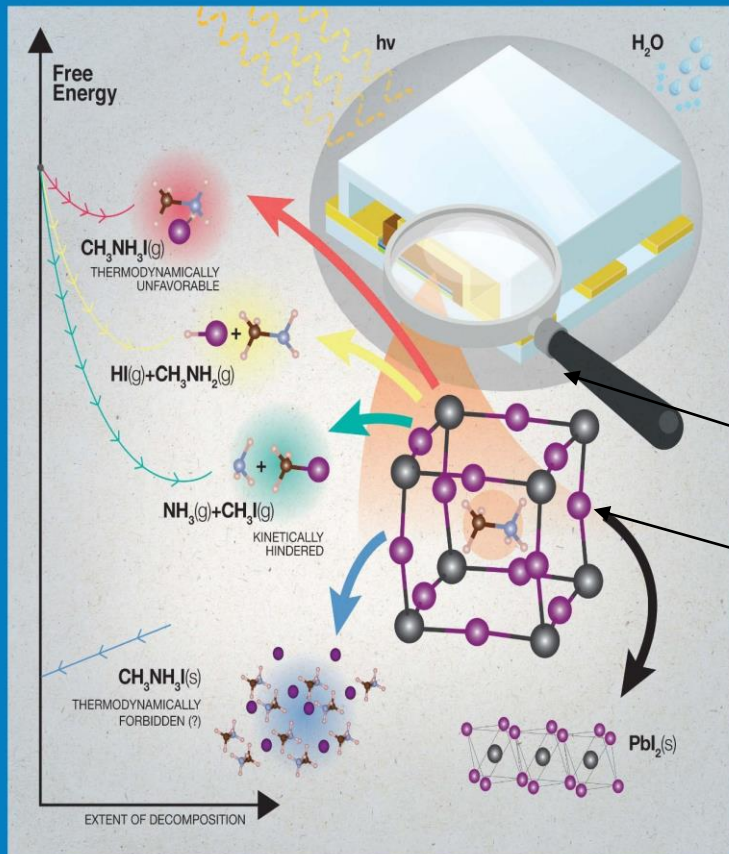
Research group:

Prof. Maria Enrica Di Cocco
Dott. Fabio Sciubba
Dott. Alberta Tomassini
Dott. Giorgia Conta
Dott. Ottavia Giampaoli

In search of viable alternatives to silicon for photovoltaic applications: organic-inorganic hybrids

THE JOURNAL OF
PHYSICAL CHEMISTRY
Letters

July 5, 2018 | Volume 9, Number 13



Intrinsic Degradation of MAPbX₃ Perovskites: Thermodynamic Driving Forces Push for Gas-Releasing Processes

Prototypical Material:
Methylammonium lead iodide
perovskite ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$)

- High efficiency photovoltaic activity
- Drawbacks: Sensitivity to moisture, Thermal instability

Multitechnique investigation of thermal
decomposition pathways:
Thermodynamics vs Kinetics

