

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

ANNA TROIANI
Curriculum Vitae

Roma, 1 ottobre 2019


Part I – General Information

Full Name	Anna Troiani
Date of Birth	
Place of Birth	
Citizenship	
Permanent Address	
Mobile Phone Number	
E-mail	
Spoken Languages	Italiano, Inglese, Francese

Part II – Education

Type	Year	Institution	Notes (Degree, Experience,...)
University graduation	1992	Sapienza Università di Roma	Laurea (cum laude) in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche
Licensure	1993	Sapienza Università di Roma	Abilitazione professione Farmacista
PhD	1997	Sapienza Università di Roma	Dottorato di ricerca in Scienze Farmaceutiche, IX Ciclo
University graduation	1998	Sapienza Università di Roma	Laurea (cum laude) in Farmacia

Part III – Appointments

IIIA – Academic Appointments

Start	End	Institution	Position

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

17/2/2014 (tornata 2012)	17/2/2020	Ministero dell’Istruzione dell’Università e della Ricerca (MIUR)	Abilitazione Scientifica Nazionale (ASN) a Professore di II fascia, Settore Concorsuale 03/B2 – Fondamenti Chimici delle Tecnologie, SSD CHIM/07 (D.D. n. 222/2012)
1/3/2002	oggi	Sapienza Università di Roma - Dipartimento Chimica e Tecnologie del Farmaco	Ricercatore Universitario confermato a tempo indeterminato (SSD CHIM/03)
2000	2002	Sapienza Università di Roma	Assegno di ricerca biennale (Dipartimento di Chimica e Tecnologia Sostanze Biologicamente Attive)
1999	1999	Sapienza Università di Roma	Contratto di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologia Sostanze Biologicamente Attive
1998	1999	Consiglio Nazionale delle Ricerche - Sapienza Università di Roma	Borsa CNR, Scienze Chimiche (12 mesi)
1997	1998	Consiglio Nazionale delle Ricerche - Sapienza Università di Roma	Borsa CNR, Scienze Chimiche (12 mesi)
1996		Istituto Centrale di Ricerca per la Chimica dell’Accademia delle Scienze Ungheresi di Budapest	Fellowship CNR nell’ambito del “Programma di scambi internazionali per la mobilità di breve durata di studiosi/ricercatori di Istituzioni di ricerca italiane e studiosi stranieri” (tre settimane)

IIIB – Other Academic Appointments

Start	End	Institution	Position
16/9/2019		Sapienza Università di Roma	Presidente commissione d’aula prova di ammissione corsi di Farmacia e di Chimica e Tecnologia del Farmaco (D.R. 2700)
2019	oggi	Sapienza Università di Roma	Commissione didattica corso di Laurea triennale Scienze Farmaceutiche Applicate
Giugno 2019		Sapienza Università di Roma, Dipartimento Chimica e Tecnologie del Farmaco	Responsabile scientifico per lo svolgimento di attività di ricerca (assegno di ricerca - categoria B - Tipologia II) della durata di 1 anno - Titolo

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

			della Ricerca: “Applicazione di tecniche spettrometriche di massa allo studio di reazioni ione-molecola in condizioni di collisione singola come modello degli stadi elementari di processi complessi”
2018	oggi	Sapienza Università di Roma	Responsabile del laboratorio di Spettrometria di Massa, Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco
2014	oggi	Sapienza Università di Roma	Componente della commissione ricerca Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco
2010	2015	Sapienza Università di Roma	Componente della commissione orario Facoltà di Farmacia e Farmacia e Medicina
2009	2010	Sapienza Università di Roma	Componente della commissione regolamento Facoltà di Farmacia
2008		Università degli Studi di Perugia	Componente della commissione per la valutazione comparative per un posto di ricercatore universitario SSD CHIM/03 – Chimica Generale ed Inorganica presso la Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell’Università degli Studi di Perugia (con nomina nella G.U. - 4° serie speciale - n. 60 del 01/8/2008)
2011	oggi	Sapienza Università di Roma	Componente di commissioni per conferimento n. 3 assegni di ricerca (1- Bando n.7 del 8/3/2011; 2- Bando n. 1/2018 prot. 427 del 14/3/2018; 3- Bando n. 5/2019 prot. 465 del 13/3/2019)
2002	oggi	Sapienza Università di Roma,	Componente delle commissioni di Laurea in Farmacia, Tossicologia dell’Ambiente, Ingegneria Aerospaziale, Aeronautica, Spaziale e Astronautica, Sapienza Università di Roma
		Sapienza Università di Roma	Relatore di tesi di laurea per il corso di Laurea magistrale in Farmacia

Part IV – Teaching experience

Year	Institution	Lecture/Course

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. **2633/2019** del **05/09/2019**

Codice Concorso **2019PAR022**

2013/14 2014/15 2015/16 2016/17 2017/18 2018/19 2019/20	Sapienza Università di Roma, Facoltà di Ingegneria Civile e Industriale	Chimica, Corso di Laurea in Ingegneria Aerospaziale, canale A-K, 9 CFU, CHIM/07
2019/20	Sapienza Università di Roma, Facoltà di Farmacia e Medicina	Chimica Generale ed Inorganica, canale E-O, Corso di Laurea triennale in Scienze Farmaceutiche Applicate, 9 CFU, CHIM/03
2016/17 2017/18 2018/19 2019/20	Sapienza Università di Roma, Facoltà di Farmacia e Medicina	Chimica Generale ed Inorganica, canale P-Z, lezioni a piccoli gruppi, - Corso di Laurea in Farmacia, 3 CFU, CHIM/03
2018/19 2019/20	Sapienza Università di Roma, Facoltà di Farmacia e Medicina	Chimica Generale ed Inorganica, canale E-O, lezioni a piccoli gruppi, - Corso di Laurea in Farmacia, 3 CFU, CHIM/03
2006/07 2007/08 2008/09 2009/10 2010/11 2011/12 2012/13 2013/14	Sapienza Università di Roma, Facoltà di Farmacia e Medicina	Chimica Analitica e Complementi di Chimica Generale ed Inorganica (canale A-L) - Corso di Laurea in Farmacia, 10 CFU, CHIM/01/03
2003/04 2004/05 2005/06	Sapienza Università di Roma, Facoltà di Farmacia	Chimica Analitica II - Corso di Laurea triennale in Tossicologia dell'ambiente, 5 CFU, CHIM/01

Part V - Society memberships, Awards and Honors

Year	Title *
2018	“Sulphur dioxide cooperation in hydrolysis reactions of vanadium oxide and hydroxide cluster dianions”, A. Troiani, M. Rosi, S. Garzoli, C. Salvitti, G. de Petris; <i>New J. Chem.</i> , 2018, 42, 4008-4016 - Back Cover Article
2017	“Vanadium Hydroxide Cluster Ions in the Gas Phase: Bond-Forming Reactions of Doubly-Charged Negative Ions by SO ₂ -Promoted V-O Activation” A. Troiani, M. Rosi, S. Garzoli, C. Salvitti, G. de Petris; <i>Chem. Eur. J.</i> 2017, 23, 11752 – 11756 - Inside Cover Article
2014	“All the 2p-block elements in a molecule: experimental and theoretical studies of FBNCO and FBNCO ⁺ ”, A. Troiani, S. Garzoli, F. Pepi, A. Ricci, M. Rosi, C. Salvitti, G. de Petris; <i>Chem. Commun.</i> , 2014, 50, 13900-13903 - Hot paper e due Highlights : 1- Chemistry World Royal Society of Chemistry (7 October 2014); 2- Chemical & Engineering News 2014, 92, 30

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

2012	“Linking Ion and Neutral Chemistry in C-H Bond Electrophilic Activation: Generation and Detection of HO ₂ . Reactive Radicals in the Gas Phase”, de Petris, G.; Angelini, G.; Ursini, O.; Rosi, M.; Troiani, A.; <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> , 2012, 51, 1455-1458 - Hot paper
2011	“The proton Affinity and Gas-Phase Basicity of Sulfur Dioxide”, G. de Petris, A. Cartoni, M. Rosi, V. Barone, C. Pizzarini, A. Troiani., <i>ChemPhysChem</i> , 2011, 12, 112-115 – Inside Cover Article
2009	“Methane Activation by Metal-Free Radical Cations: Experimental Insight into the Reaction Intermediate”, G. de Petris, A. Troiani, M. Rosi, G. Angelini, O. Ursini, <i>Chem. Eur. J.</i> , 2009, 15, 4248-4252 - Highlight in “News and Views”, Nature Chemistry: “C–H bond activation: A radical non-metal solution”, Robert H. Crabtree, 1, 348, 2009
2003	“Experimental Detection of the H ₂ NO ₃ Radical”, F. Cacace, G. de Petris, A. Troiani, <i>ChemPhysChem</i> , 2003, 4, 1128-1131 - Cover Article
2002	“Experimental Detection of Tetranitrogen”, F. Cacace, G. de Petris, A. Troiani, <i>Science</i> , 2002, 295, 480-481 - Chemistry Highlights 2002 in Chemical & Engineering News V. 80, No. 50, 42-43. La scoperta del tetrazoto è stata considerata dalla American Chemical Society tra i più importanti risultati nella chimica inorganica nel 2002
2001	“Experimental Detection of Tetraoxygen”, F. Cacace, G. de Petris, A. Troiani, <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> , 2001, 40, 4062-4065 - Due Highlights in: 1- “News about Oxygen” in <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> 2002, 41, 573; 2- “New form of oxygen found”, Nature News, Published online 16 November 2001, DOI:10.1038/news011122-3
2001	“Ionization of O ₃ in Excess N ₂ . A New Route to N ₂ O via Intermediate [N ₂ O ₃] ⁺ Complexes”, F. Cacace, G. de Petris, M. Rosi, A. Troiani, <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> , 2001, 40, 1938-1941 - Press Release in <i>Angewandte Chemie Int. Ed.</i> (n. 10/2001)

*copia dei riconoscimenti editoriali è riportata nel file pdf relativo ai titoli

Part VI – Other activities

Year	Title
22/10/2018	Organizzazione seminario del Prof. Helmut Schwarz dal titolo “The Methane Challenge: Selective C-H Bond Activation and C-C Coupling by Metal Oxides and Metal Carbides”
2000-oggi	Collaborazioni con gruppi di ricerca nazionali ed internazionali: Prof. Marzio Rosi, Università di Perugia Prof.ssa Andreina Ricci, Università della Campania Vanvitelli Dott. Giancarlo Angelini, CNR Prof. Edoardo Giglio, Sapienza Università di Roma Prof. Andrea Bottoni, Università di Bologna Prof. Helmut Schwarz, Berlin Technische Universität Prof. Karl Kirchner, Vienna University of Technology

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

2000-oggi	Partecipazione a congressi nazionali ed internazionali (poster e presentazioni orali) n. 15
-----------	---

Part VII - Funding Information [grants as PI-principal investigator or I-investigator]

Year	Title	Program, Grant value
2018	Reazioni ione-molecola in fase gassosa in condizioni di collisione singola come modello degli stadi elementari di processi complessi, studiate mediante tecniche spettrometriche di massa avanzate (principal investigator)	Sapienza Università di Roma (Ateneo, progetti medi RM11816428291DFF) € 12500 + € 23800 Assegno ricerca
2017	Specie ioniche reattive in fase gassosa come modelli di processi utili nella conversione in commodity chemicals (principal investigator)	Sapienza Università di Roma (Ateneo, progetti medi, RM11715C81A54060) € 10000
2014	Studio di reazioni ione-molecola in fase gassosa come modello di processi catalitici in fase eterogenea (principal investigator)	Progetti di Ricerca Universitari (Ateneo, progetti medi, C26A14EH44) € 7000
2012	Studio di specie reattive per l'attivazione di legami C-H e C-C in fase gassosa e all'interfaccia gas-solido mediante tecniche spettrometriche di massa avanzate (principal investigator)	Progetti di Ricerca Universitari C26A123BEW € 8000
2002	Formazione di ioni O_3^+ per ionizzazione di Ossigeno (principal investigator)	Finanziamento MIUR "Progetto Giovani Ricercatori" G1235737 € 8500
2000	Indagine sull'esistenza di specie neutre instabili ossidi dello Xenon (principal investigator)	Finanziamento MURST "Progetto Giovani Ricercatori" G113777 € 10329
2010	Chimica ionica e neutra in fase gassosa (I)	FIRB 2010 "Futuro in Ricerca"
2009	Studi di interesse fondamentale e multidisciplinare di specie e processi ionici e neutri in fase gassosa (I)	PRIN 2009
2007	Studio di specie neutre di interesse fondamentale e multidisciplinare e di processi ionici di interesse atmosferico (I)	PRIN 2007 2007WLBXX9_001

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. **2633/2019** del **05/09/2019**

Codice Concorso **2019PAR022**

2005	Studio di specie neutre di interesse fondamentale e multidisciplinare e di processi ionici di interesse atmosferico (I)	PRIN 2005 2005037899_001
2003	Nuove specie cariche e neutre e reazioni ione-molecola di interesse per la chimica dei materiali ad alta densità di energia (HEDM) e per la chimica atmosferica (I)	PRIN 2003 2003035479_001
2018	Platform for a precision mass measurement in sequencing of therapeutic proteins (PREMISE) (I)	Progetti di Ricerca Universitari Grandi Attrezzature Scientifiche
2016	LC-MS based metabolomics approach to identify potential biomarkers in Hh-dependent tumors, and to assess the Gli inhibition effects of small organic molecules and natural compounds. (I)	Progetti di Ricerca Universitari Attrezzature Scientifiche - Medie Attrezzature
2016	Struttura e reattività in fase gassosa di specie ioniche e neutre "isolate": modelli di conversione di biomasse e idrocarburi in "platform chemicals" (I)	Progetti di Ricerca (Medi)
2015	Studi in fase gassosa di reattività e struttura di specie isolate ioniche e neutre di interesse fondamentale e multidisciplinare (I)	Progetti di Ricerca Universitari
2013	Rivelazione di prodotti neutri da reazioni ione-molecola mediante l'accoppiamento di tecniche spettrometriche di massa e spettroscopiche (I)	Progetti di Ricerca Universitari
2011	Chimica ionica in fase gassosa di specie reattive. Studio delle interazioni ione-superficie solida mediante tecniche spettrometriche di massa avanzate (I)	Progetti di Ricerca Universitari
2010	Studi avanzati di chimica ionica e neutra in fase gassosa (I)	Progetti di Ricerca Universitari
2009	Studi di processi ionici ed intermedi transienti di interesse atmosferico e fondamentale (I)	Progetti di Ricerca Universitari
2009	Studi di reazioni ione-molecola in fase gassosa (I)	Ricerche di Ateneo Federato
2008	Studio di specie neutre e processi ionici di interesse fondamentale e multidisciplinare (I)	Ricerche Universitarie
2008	Chimica ionica e neutra in fase gassosa (I)	Ricerche di Ateneo Federato
2007	Studio di specie e processi ionici e radicalici di interesse atmosferico: identificazione e caratterizzazione strutturale di nuove molecole inorganiche e studi di reattività (I)	Ricerche Universitarie
2007	Reazioni ione-molecola e studi di intermedi reattivi carichi e neutri in fase gassosa (I)	Ricerche di Ateneo Federato

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

2006	Studio di specie reattive cariche e neutre in fase gassosa di interesse fondamentale e/o multidisciplinare (I)	Ricerche di Ateneo
2006	Chimica ionica e neutra in fase gassosa (I)	Ricerche di Facoltà
2005	Studio di specie neutre di interesse fondamentale e multidisciplinare e di processi ionici di interesse atmosferico (I)	Ricerche di Ateneo
2005	Chimica ionica e neutra in fase gassosa (I)	Ricerche di Facoltà
2004	Studio di specie neutre transienti di interesse fondamentale e multidisciplinare, e di processi ionici di interesse atmosferico (I)	Ricerche di Ateneo
2003	Studio di processi ionici di interesse atmosferico, preparazione e caratterizzazione di molecole modello come materiali ad alta densità di energia (I)	Ricerche di Ateneo
2003	Studio di specie reattive cariche e neutre di interesse fondamentale e/o interdisciplinare (I)	Ricerche di Facoltà
2002	Studio di nuove molecole e reazioni di interesse per la chimica atmosferica e/o dei materiali ad alta densità di energia (I)	Ricerche di Ateneo
2002	Studio in fase gassosa di reazioni ioniche e loro prodotti carichi e neutri di interesse fondamentale e/o interdisciplinare (I)	Ricerche di Facoltà
2002	Progetto per il completamento dello spettrometro ZabSpec oa-tof con una trappola ionica (I)	Acquisizione di medie e grandi attrezzature scientifiche

Part VIII – Research Activities**Keywords**

spettrometria di massa
attivazione di legame (C-H, C-alogeno e C-C coupling) in idrocarburi ed alocarburi
reazioni ione-molecola
reazioni intracluster
reazioni elementari
cinetica, energetica e meccanismo di reazione

Brief Description

La candidata ha svolto la sua attività scientifica nell'ambito della chimica in fase gassosa, ionica e neutra, utilizzando tecniche spettrometriche di massa avanzate. La fase gassosa consente di studiare le proprietà intrinseche di specie reattive o intermedi di reazione, spesso specie elusive a vita breve, in assenza di quegli effetti mascheranti che tipicamente operano negli stati condensati, quali

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

solvatazione, polarità e viscosità del solvente o presenza di contro ioni. La possibilità di generare allo stato isolato clusters di composizione e carica ben definite, di controllare in modo fine dettagli molecolari e condizioni sperimentali, consente di “scindere” nei singoli stadi elementari reazioni complesse ed indirizzare quindi l’indagine sperimentale alla determinazione delle caratteristiche reattive intrinseche di una specie. Scopo ultimo di questo approccio è infatti trovare una chiave interpretativa molecolare per processi complessi, utile nella definizione di modelli meccanicistici generali che costituiscono il quadro di riferimento per analoghi processi in soluzione o in fase eterogenea di interesse fondamentale e multidisciplinare. Una peculiarità delle tematiche di ricerca affrontate è quella di fornire input innovativi, le cui ricadute e sviluppi, anche applicativi, appaiono tuttavia dopo un elevato lasso di tempo. Un esempio è lo studio della reattività di cluster ionici modello, anche multicarica, che mimano specifici centri reattivi presenti sulle superfici di catalizzatori. È infatti ormai accettata la nozione che proprio i difetti presenti sulle superfici, dovuti ad esempio a un eccesso o difetto di cariche, siano responsabili dell’attività catalitica che si manifesta quindi come un evento chimico locale. Tuttavia, l’individuazione e la riproduzione di questi difetti in un catalizzatore reale è molto difficile, mentre è possibile preparare clusters ionici definiti strutturalmente a livello molecolare, le cui dimensioni possano essere modificate passando da pochi a diversi atomi fino ad avvicinarsi a quelle di una superficie. In questo contesto gli studi affrontati dalla candidata riguardano la trasformazione di idrocarburi in composti a più alto valore aggiunto, del biossido di zolfo ad acido solforico, e di monosaccaridi a composti platform. Una seconda linea di ricerca, che ha portato alla pubblicazione di due articoli sulla rivista Science, riguarda la scoperta di nuove molecole, fino ad allora previste esclusivamente da studi teorici, che sono state rivelate dalla candidata per tempi di vita brevi e solo dopo molti anni sono state isolate in laboratorio in fase condensata.

Calcoli teorici in collaborazione con altri gruppi di ricerca, hanno affiancato, laddove necessario, i risultati sperimentali contribuendo a delineare un quadro più completo delle caratteristiche strutturali ed energetiche delle specie coinvolte e dei possibili cammini reattivi lungo la superficie di energia potenziale. Allo scopo di meglio evidenziare lo sviluppo organico, sistematico e coerente delle tematiche affrontate, le due principali linee di ricerca, brevemente esposte, includono sia le pubblicazioni scelte per la presente valutazione (**pubblicazioni selezionate** indicate **S1-S12**) sia le altre pubblicazioni (**P1-P68**, SU1 pubblicazione submitted, P1 non ancora registrata in Scopus). Altri temi più specifici sono trattati di seguito.

L’intera produzione scientifica, effettuata con continuità, è caratterizzata da 68 pubblicazioni con un Impact Factor totale di 334,794 con una media di autori per articolo pari a 4,7.

1-Reazioni modello per processi di trasformazione di anidride solforosa, carboidrati e idrocarburi.

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

Queste reazioni sono state studiate per fornire un utile modello alla descrizione a livello molecolare di processi complessi di interesse industriale: **a-** reazioni intracluster e di ossidazione di SO₂, **b-** trasformazione di monosaccaridi in composti platform, **c-** attivazione e funzionalizzazione di idrocarburi inerti (CH₄, etano, alometani) in composti a più alto contenuto energetico. È noto infatti che la trasformazione di materie prime in prodotti a maggior contenuto energetico o valore aggiunto occupa un ruolo centrale nella ricerca e nella tecnologia, a causa dell'aumento consistente della domanda energetica globale che rende urgente la ricerca di fonti energetiche sostenibili.

1a - La candidata ha studiato una serie di reazioni di clusters contenenti SO₂, la cui caratteristica comune è quella della formazione di intermedi stabili, grazie al dipolo permanente di SO₂ ed alle forze attrattive ione-dipolo, che consentono di osservare una chimica intracluster complessa di interesse fondamentale ed applicativo (processi atmosferici o processi rilevanti per la produzione industriale di acido solforico).

Una reattività del tutto nuova, mai osservata prima per anioni doppiamente carichi, è stata scoperta nell'interazione di SO₂ con idrossianioni doppiamente carichi del Vanadio(V), lo ione pirovanadato H₂V₂O₇²⁻ e lo ione polivanadato HNaV₄O₁₂²⁻ (**S6**). Si tratta di reazioni *bond forming* che consistono nella formazione e rottura concertata di legami, in cui lo scheletro del dianione si scinde in due ioni monocarichi, ed il reattivo neutro viene inglobato in uno solo dei due monoanioni. L'interazione con SO₂ promuove in H₂V₂O₇²⁻ la rottura di legami forti V-O del gruppo V₂O₇ per formare nuovi legami V-O e S-O, e in HNaV₄O₁₂²⁻ promuove la rottura del legame terminale V-OH. Questa nuova reattività è particolarmente importante se si pensa che anioni multicarichi sono instabili in fase gassosa, poiché l'eccesso di carica non gode degli effetti di stabilizzazione che operano in soluzione. Pertanto, la reazione comunemente osservata con dianioni in fase gassosa è il trasferimento di elettrone, mentre in questo caso il processo di separazione di carica avviene esclusivamente come risultato di una reazione chimica con SO₂. Per questo i risultati ottenuti sono stati prescelti per l'illustrazione della **copertina della rivista Chemistry-A European Journal**, sulla quale è stato pubblicato lo studio.

Un'altra reazione intracluster mai osservata con dianioni in fase gassosa è la reazione di idrolisi, una reazione fondamentale le cui basi molecolari sono state attribuite da studi teorici al legame idrogeno. La candidata ha osservato una reazione di idrolisi promossa da SO₂ attraverso una cooperazione tra SO₂, H₂O e il dianione di vanadio, in particolare V₂O₆²⁻ oppure l'idrossido HV₃O₉²⁻ (**S4**). All'interno del cluster, la polarizzabilità di SO₂ rafforza il legame idrogeno con l'acqua favorendo la rottura eterolitica del legame O-H, con conseguente trasferimento di protone al dianione e di OH⁻ all'SO₂ con formazione di bisolfito, vera driving force dell'intero processo. Anche in questo caso i risultati ottenuti sono stati prescelti per la **copertina della rivista New Journal of Chemistry**.

L'ossidazione diretta dell'SO₂ è stata osservata in clusters con ossoanioni selezionati che hanno

prodotto reazioni generalmente veloci ed efficienti, nonostante gli anioni siano generalmente meno reattivi dei cationi. Ossoanioni alogenati O_nXO^- ($X=Cl, Br, I; n=0$ e 1) (**S11**) promuovono reazioni di ossidazione di SO_2 che formalmente corrispondono al trasferimento di atomo di ossigeno (OAT), a quello di ione ossigeno (OIT) e al doppio trasferimento di ossigeno (DOT) con formazione rispettivamente di: SO_3 , SO_3^- e SO_4^- . Queste reazioni sono anche una fonte di radicali $ClO\cdot$, $BrO\cdot$, e $IO\cdot$ e alogeno, le cui dimerizzazioni o reazioni con costituenti dell'atmosfera sono ben note, in particolare a carico di $BrO\cdot$ e $IO\cdot$. Gli osso anioni mononucleari CrO_4^- e CrO_2^- , ad alto e basso stato di ossidazione, presentano una diversa reattività dovuta alla differente distribuzione di carica e spin ed anche alle proprietà di acido borderline di SO_2 (**S2**). Di conseguenza, CrO_4^- promuove l'ossidazione di SO_2 ad SO_3 , mentre CrO_2^- promuove la riduzione di SO_2 a SO .

Il ruolo della carica è invece meno importante nel caso di clusters ionici di carbonato di sodio (**S1**), $(Na_2CO_3)_nNa_x^{x+}$ e $(Na_2CO_3)_n(NaCO_3)_x^{x-}$, che indipendentemente dal numero di cariche e dalla polarità, sono quantitativamente ed efficacemente convertiti nei corrispondenti clusters solfito per reazione con SO_2 . La presenza di $NaOH$ determina un cambiamento di reattività, poichè si osserva anche una competizione tra lo scambio SO_2/CO_2 intracluster e quello intermolecolare. Anche se non è sempre possibile estendere le proprietà osservate nei cluster a quelle delle nanoparticelle, essi rappresentano tuttavia un modello per le reazioni di solfatazione che si verificano sui carbonati o per l'adsorbimento reattivo di SO_2 in aerosol atmosferici.

Infine un contributo alla ricerca fondamentale riguardante il biossido di zolfo è stato quello di fornire un valore estremamente accurato della sua affinità protonica (PA) (**P20**), fino ad allora sovrastimata di ben 8 kcal mol^{-1} . Il lavoro è stato prescelto per la **copertina** di ChemPhysChem vista l'accuratezza delle misure e l'importanza di una molecola fondamentale come il biossido di zolfo.

1b –La 2-furaldeide (2-FA) e la 5-idrossimetilfuraldeide (5-HMF) sono composti detti piattaforma, inclusi nella lista “Top 10+4” delle sostanze di origine naturale precursori di combustibili per il trasporto ed intermedi sostenibili nella preparazione di prodotti chimici a base furanica. È noto che 2-FA e 5-HMF si ottengono rispettivamente dai monosaccaridi C5 e C6 per tripla disidratazione catalizzate da acidi minerali. La candidata ha dimostrato che in fase gassosa esosi e pentosi seguono un meccanismo comune di disidratazione acido catalizzata, in cui la perdita della prima molecola di H_2O avviene dal carbonio adiacente l'ossigeno emiacetalico C1 per il glucosio (**S10**) ed i pentosi (**P7**) e C2 per il fruttosio (**S9**). La ricerca di una via selettiva alla formazione di 5-HMF è stata effettuata studiando il processo di disidratazione in complessi protonati tra D-fruttosio e varie basi, e dimostrando che se la base viene rilasciata all'inizio della sequenza di disidratazione il processo mima la disidratazione acido catalizzata, se invece la base resta nel complesso assistendo la disidratazione fino alla fine si ha la formazione esclusiva di $5HMF \cdot H^+$ (**P1**).

Strettamente correlata è la decomposizione acido catalizzata dell'acido ascorbico (**S3**), composto

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

strutturalmente simile ai carboidrati. Se da un lato sono ben note le proprietà nutrizionali della vitamina C, dall'altro è ancora sconosciuto il meccanismo della sua degradazione termica e/o acido catalizzata attraverso cui porta alla formazione di prodotti furanici altamente tossici. Il furano è stato infatti inserito nel 1995 nella lista IARC dei potenziali cancerogeni per l'uomo. La candidata ha identificato una via di decomposizione non ossidativa dell'acido ascorbico responsabile della formazione di un derivato a struttura formil-furanica, per perdita di due molecole di H₂O e di acido formico. La candidata si è anche dedicata allo studio di aspetti più squisitamente fondamentali, misurando la basicità e l'affinità protonica in fase gassosa dell'acido ascorbico (**S7**) e della 5-HMF (**UP1**).

1c –Tra le reazioni modello di processi complessi, l'attivazione del legame C-H di idrocarburi inerti come il metano è definita l'"holy grail" della chimica moderna. Essa costituisce il primo stadio elementare del processo di funzionalizzazione per la formazione di composti a più elevato valore aggiunto. La candidata ha studiato gli aspetti meccanicistici correlati all'attivazione C-H in idrocarburi ed alocarburi semplici utilizzando elettrofili non metallici come SO₂⁺, O₂⁺, CO⁺ e SiO⁺. Tra i risultati più rilevanti vi è l'attivazione del CH₄ da parte dello ione SO₂⁺, modello di catione radicale all'ossigeno open-shell, che avviene attraverso una reazione di estrazione di atomo di idrogeno (HAT) veloce ed efficiente (**P25**). La rivelazione sperimentale dell'intermedio e la sua analisi sostanziano l'intervento di complessi metilici [H₃C···H-OSO]⁺ suggeriti nell'attivazione elettrofila metal-free del metano. Una **recensione** del lavoro su Nature Chemistry (1, 348, 2009) ha definito il risultato ottenuto una via innovativa per la trasformazione di idrocarburi in composti più facilmente utilizzabili. Gli effetti di carica e spin in questi processi sono stati approfonditi nella reazione di doppia attivazione del legame C-H dell'etano (**P27**). La reazione avviene in due stadi, che coinvolgono rispettivamente un HAT ed un trasferimento inner-sphere di elettrone. I processi ad 1 o 2 elettroni sono stati poi studiati più in dettaglio nell'attivazione del legame C-H di alometani CH₂X₂ (X = Cl, F). In questo caso la scelta di un elettrofilo come O₂⁺ ha consentito di studiare la reazione entrando sulla superficie di energia da due canali "speculari": O₂⁺ + CH₂F₂ e CH₂Cl₂⁺ + O₂ (**P17**). Con elettrofili più soft come SO⁺, si osserva invece solo l'attivazione di legami C-alogeno in reazioni di trasferimento a due elettroni (**P15**). Tra i risultati di maggior rilievo ottenuti con questi substrati vi è la prima prova sperimentale diretta della formazione di un radicale reattivo (HO₂) in una reazione di attivazione elettrofila del legame C-H (**P18**). Questo studio volto a identificare i prodotti neutri derivanti da reazioni ione-neutro ha posto le basi per l'analisi dei radicali prodotti da reazioni di attivazione del legame C-H, considerati i veri protagonisti delle reazioni di funzionalizzazione di idrocarburi. La relativa pubblicazione è stata classificata come **hot paper** nella rivista Angewandte Chemie.

La formazione di legami C-C osservata dalla reazione di un derivato del ferrocene con il cloruro di metilene rappresenta lo sviluppo naturale delle reazioni di attivazione di legame C-H, in quanto la

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

funzionalizzazione del metano implica proprio una reazione di accoppiamento C-C di due radicali metili come evento ultimo (S8). La reazione porta alla formazione di benzene protonato e cloruro ferroso, identificati entrambi sperimentalmente, con un meccanismo che comporta l'estrusione del metallo dal complesso attraverso una notevole riorganizzazione dell'intermedio.

Vanno infine menzionati in questa linea di ricerca le reazioni con il metano di elettrofili all'ossigeno degli elementi del quarto gruppo CO^+ e SiO^+ (P16), del Cl_3^+ (P59) e dell' O_2^+ (P31).

2-Rivelazione e caratterizzazione di specie neutre

Le motivazioni di questa parte dell'attività di ricerca sono legate all'interesse fondamentale insito nella scoperta e descrizione di nuove specie chimiche, a cui si unisce l'impatto multidisciplinare ed il potenziale interesse applicativo delle specie scoperte. Infatti la preparazione e caratterizzazione di nuove molecole è un obiettivo importante in molti settori di ricerca tra cui la ricerca di materiali ad alta densità di energia (HEDM), di potenziale utilizzo come propellenti di nuova generazione, la chimica atmosferica e la chimica biologica. In quanto specie transienti, esse svolgono ruoli fondamentali come carriers di processi atmosferici o biologici, oltre ad essere uno dei target principali delle più recenti missioni spaziali.

Le molecole e i radicali caratterizzati dalla candidata sono specie transienti con tempi di vita dell'ordine dei microsecondi, la cui stabilità è spesso di tipo cinetico, e dunque la loro rivelazione sfugge alle vie sintetiche tradizionali. I risultati conseguiti, che costituiscono la prima osservazione sperimentale di molecole totalmente sconosciute o solo previste dalla teoria, sono stati ottenuti con la spettrometria di massa a neutralizzazione e riionizzazione, NRMS, tecnica avanzata implementata in strumentazioni appositamente modificate per lo scopo.

Tra i risultati di maggior rilievo vi sono la scoperta delle specie elementari dell'ossigeno ed azoto quali il tetraossigeno, O_4 (P50), il tetrazoto, N_4 (P48), e la scoperta del triossido d'idrogeno, HO_3 (P58) e del radicale BFNCO (S12). Le scoperte del tetraossigeno e tetraazoto hanno completato la conoscenza delle forme elementari di ossigeno ed azoto che fino al 2001 erano limitate alle molecole bi- e trivalenti, O_2 e N_2 , O_3 ed N_3 . Alla scoperta del tetraossigeno sono stati dedicati **due highlights: in Angewandte Chemie dal titolo: “News about Oxygen”** (*Angew. Chem. Int. Ed.* 2002, 41, 573) e in *Nature News*, 16 November 2001, DOI:10.1038/news011122-3 dal titolo **“New form of oxygen found”**, ed è oggi citato da Wikipedia tra le forme allotropiche dell'ossigeno. **La scoperta del tetrazoto**, pubblicata sulla rivista *Science*, è stata considerata dalla **American Chemical Society** (cfr. **Chemistry Highlights 2002**, in *Chemical & Engineering News* V. 80, No. 50) tra i **più importanti risultati conseguiti nella chimica inorganica** nel 2002.

La scoperta del triossido d'idrogeno, HO_3 (P58), pubblicata anch'essa su *Science*, ha dimostrato per la prima volta l'esistenza di un importante intermedio di reazioni di interesse atmosferico, biologico

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

e della chimica delle superfici di silicio, a lungo ricercato e postulato da calcoli teorici, la cui struttura è stata determinata solo alcuni anni più tardi mediante spettroscopia rotazionale (Y. Endo et al., *Science*, 2005, 308, 1885-6). Il radicale BFNCO è una specie a 35 elettroni costituita da tutti gli elementi del blocco p del secondo periodo (**S12**). Alla scoperta di questo radicale è stata dedicata una importante **recensione su Chemistry and Engineering News** che lo ha definito: “*a winning combination in elemental bingo*” e ne ha suggerito il ruolo di building block in nanofilms di potenziale applicazione in campo elettronico. Inoltre il lavoro, classificato come **hot paper** in ChemComm, ha anche ottenuto un **highlight in Chemistry World** della RSC.

Il radicale N₂CO (**P37**) è una molecola a 28 elettroni isoelettronica con N₄ e con il dimerico del monossido di carbonio (CO)₂ dell'esistenza del quale è stata fornita la prima prova sperimentale. Solo recentemente, nel 2011 è stata riportata la prima sintesi di un composto di formula N₂CO, il diazirinone, isolato come un solido giallo a 77 K (H. Beckers, H. Willner et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2011, 50, 1720-3), dimostrando il carattere d'avanguardia delle ricerche svolte su queste nuove specie elusive.

In questa linea di ricerca va infine ricordata la rivelazione del complesso di trasferimento di carica H₂O⁺O₂⁻ (CT) (**P55**), intermedio chiave del processo di fotonucleazione atmosferica; di nuovi ossidi di azoto come N₂O₂, (NO)₂ (**P41**) e N₃O (**P19**); del radicale H₂NO₃ (**P42**), **quest'ultimo scelto per la copertina di ChemPhysChem**; del tetrossido di carbonio CO₄ (**P43**) e del radicale HONF• (**P40**); di nuove specie neutre o radicaliche ricche di zolfo, alcune di interesse per le atmosfere planetarie di Io e Venere: gli ossidi S₂O₃ (**P52**) e S₃O (**P32, P49**), l'idrossido SSOH e l'isomero tiosulfenossido HSSO (**P30**), i radicali HS₃ (**P26**) e HS₄ (**P23**), CS₂O (**P35**), e CS₂OH (**P33**).

Di seguito sono descritti altri temi di ricerca più specifici

- *Chimica dell'ozono in gas atmosferici ionizzati*

Lo studio della chimica dell'ozono in miscele ionizzate in gas atmosferici (N₂, O₂) e contenenti microinquinanti diversi ha avuto lo scopo di identificare nuove sorgenti e processi distruttivi dell'ozono, le cui trasformazioni sono legate in modo molto complesso a quelle di altre specie che prendono parte ai suoi processi di formazione e distruzione. I risultati ottenuti hanno messo in luce il comportamento generale dell'O₃ come donatore di atomo di ossigeno in presenza di microinquinanti con basso potenziale di ionizzazione. Sono state studiate le reazioni in miscele ionizzate di ozono con clorofluorocarburi (freon) CHXY₂ (X=H, Cl, F; Y=Cl, F) (**P54**), con solfuro di carbonile SCO (**P53**), con CS₂ (**P36**), con ossidi di azoto NO e NO₂ (**P45**), con H₂O (**P34**).

Sono state studiate reazioni di interesse per sistemi in condizioni di “non equilibrio”, come quelli che si realizzano con elevate concentrazioni locali di ozono in fenomeni naturali come i fulmini o processi indotti ad esempio da scariche corona lungo le linee dell'alta tensione. Un esempio è la reazione O₃⁺

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

+ N₂ (**P51**) come canale di formazione dell'ossido di diazoto, N₂O, un gas serra. I risultati ottenuti sono stati oggetto di un **press release in Angewandte Chemie Int. Ed. n. 10/2001**. Anche l'intermedio O₄⁺, che porta alla formazione di O₃⁺ dalla reazione O₂⁺ + O₂, è stato identificato nella frazione che si forma da ioni eccitati O₂⁺(⁴Π_u) e O₂ (**P46**).

- Chimica ionica di ioni polialogenati inorganici

È stata studiata la reattività di trihalogenocazioni Cl₃⁺ e Cl₂F⁺, che sono stati dimostrati essere degli efficaci agenti cloruranti in fase gassosa (**P60**). È stata determinata una scala qualitativa di affinità per lo ione Cl⁺ di una serie di nucleofili, mentre valori quantitativi sono stati ottenuti per HCl, ClF e Cl₂. La reattività del Cl₃⁺ con il CH₄, già descritto in precedenza (**P59**), ha anche portato alla scoperta di un nuovo isomero del cloruro di metilene protonato, lo ione CH₃Cl₂⁺ di connettività H₃C-Cl-Cl⁺. Sono state inoltre misurate la PA del CH₂Cl₂ e l'affinità per il catione metile di Cl₂ (**P59**). Sono stati preparati e caratterizzati strutturalmente ioni Cl₂O₂⁺ e Cl₂O₂⁻ (**P57**), di interesse nei processi di distruzione dell'ozono stratosferico.

- Anioni instabili in fase gassosa

Anioni instabili sono stati rivelati e caratterizzati per la prima volta, utilizzando opportuni precursori ionici positivi stabili mediante processi di trasferimento verticale di elettrone, passando attraverso la formazione di una specie neutra (^{+/-}NR^{-/+}, neutralization-reionization), oppure direttamente in un processo a due elettroni (^{+/-}CR^{-/+}, charge reversal). Tra questi gli anioni HS₃⁻ (**P26**) e HS₄⁻ (**P23**), che sono le basi coniugate rispettivamente dei solfani H₂S₃ e H₂S₄, acidi forti che si formano nel processo di Claus ritenuti responsabili della corrosione dell'acciaio dei serbatoi contenenti il sour gas; l'anione HO₃⁻, che è la base coniugata del triossido di diidrogeno, HOOOH un importante intermedio di processi rilevanti per la chimica atmosferica o il trattamento delle acque, come l'ozonizzazione (**P44**); gli anioni HSSO⁻ e SSOH⁻ (**P30**).

Part IX – Summary of Scientific Achievements

Product type	Number	Source	Start	End
Papers [international]	67 ^S	Scopus (Author ID: 6701828284)	1997	2019

Index	Database	Value
Total Impact Factor*	InCites Journal Citation Reports	334,794
Average Impact Factor* per Product	InCites Journal Citation Reports	5,00
Total Citations	Scopus	958

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

Average Citations per Product	Scopus	14,3
Hirsch (H) index	Scopus	15

* IF relativo all'anno di pubblicazione

§ Esclusa la pubblicazione P1 non ancora registrata in Scopus
aggiornamento 1 ottobre 2019

Part X– Selected Publications (n. 12)

IF relativo all'anno di pubblicazione - InCites Journal Citation Reports

Citazioni: banca dati di riferimento SCOPUS - ultimo aggiornamento 1 ottobre 2019

- S1)** “Gas-Phase Reactivity of Carbonate Ions with Sulfur Dioxide: An Experimental Study of Clusters Reactions”, A. Troiani, C. Salvitti, G. de Petris; *J. Amer. Chem. Soc. Mass Spectrom.*, **2019**, DOI:10.1007/s13361-019-02228-0; first online: 8/7/2019. **(Co-Corresponding Author)**
IF = 3,202 – citazioni: 0
- S2)** “Effective redox reactions by chromium oxide anions: Sulfur dioxide oxidation in the gas phase”, A. Troiani, M. Rosi, S. Garzoli, C. Salvitti, G. de Petris;
Int. J. Mass Spectrom., 2019, 436, 18-22. **(Co-Corresponding Author)**
DOI: 10.1016/j.ijms.2018.11.00
IF = 1,658 – citazioni: 1
- S3)** “From ascorbic acid to furan derivatives: the gas phase acid catalyzed degradation of vitamin C”, P. Cimino, A. Troiani, F. Pepi, S. Garzoli, C. Salvitti, B. Di Rienzo, V. Barone, A. Ricci; *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20, 17132-17140.
DOI: 10.1039/c8cp01893f
IF = 3,567 – citazioni: 0
- S4)** “Sulphur dioxide cooperation in hydrolysis reactions of vanadium oxide and hydroxide cluster dianions”, A. Troiani, M. Rosi, S. Garzoli, C. Salvitti, G. de Petris; *New J. Chem.*, 2018, 42, 4008--4016. **(Co-Corresponding Author)**
back Cover Article
DOI: 10.1039/c7nj05011a
IF = 3,069 – citazioni: 2
- S5)** “Formation of Mono Oxo Molybdenum(IV) PNP Pincer Complexes: Interplay between Water and Molecular Oxygen”, S. R. M. M. de Aguiar, O. Oztopcu, A. Troiani, G. de Petris, M. Weil, B. Stoger, E. Pittenauer, G. Allmaier, L. F. Veiros, K. Kirchner; *Eur. J. Inorg. Chem.* 2018, 876–884.
DOI: 10.1002/ejic.201701413
IF = 2,578 – citazioni: 1
- S6)** “Vanadium Hydroxide Cluster Ions in the Gas Phase: Bond-Forming Reactions of Doubly-Charged Negative Ions by SO₂-Promoted V-O Activation” A. Troiani, M. Rosi, S. Garzoli, C. Salvitti, G. de Petris; *Chem. Eur. J.* 2017, 23, 11752-11756 **(Co-Corresponding Author)**
inside Cover Article
DOI: 10.1002/chem.201702165

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

IF = 5.16 – citazioni: 8

- S7)** “Vitamin C: an experimental and theoretical study on the gas-phase structure and ion energetics of protonated ascorbic acid”, A. Ricci, F. Pepi, P. Cimino, A. Troiani, S. Garzoli, C. Salvitti, B. Di Rienzo, V. Barone; *J. Mass Spectrom.* 2016, 51, 1146–1151.
DOI: 10.1002/jms.3848
IF = 2,381 – citazioni: 1
- S8)** “Iron-Promoted C-C Bond Formation in the Gas Phase”, A. Troiani, M. Rosi, S. Garzoli, C. Salvitti, G. de Petris; *Angew. Chem. Int. Ed.* 2015, 54, 14359 –14362. **(Co-Corresponding Author)**
DOI: 10.1002/anie.201506932
IF = 11,709 – citazioni: 2
- S9)** “A mass spectrometric study of the acid-catalysed D-fructose dehydration in the gas phase”, F. Pepi, A. Ricci, S. Garzoli, A. Troiani, C. Salvitti, B. Di Rienzo, P. Giacomello; *Carbohydrate Research* 2015, 413, 145-150.
DOI: 10.1016/j.carres.2015.05.013
IF = 1,817 – citazioni: 4
- S10)** “Acid-catalysed glucose dehydration in the gas phase: a mass spectrometric approach”, A. Ricci, B. Di Rienzo, F. Pepi, A. Troiani, S. Garzoli, P. Giacomello; *J. Mass Spectrom.* 2015, 50, 228-234.
DOI: 10.1002/jms.3525
IF = 2,541 – citazioni: 7
- S11)** “The oxidation of sulfur dioxide by single and double oxygen transfer paths”, A. Troiani, M. Rosi, C. Salvitti, G. de Petris; *ChemPhysChem*, 2014, 15, 2723-2731. **(Co-Corresponding Author)**
DOI: 10.1002/cphc.201402306
IF = 3,419 – citazioni: 4
- S12)** “All the 2p-block elements in a molecule: experimental and theoretical studies of FBNCO and FBNCO”, A. Troiani, S. Garzoli, F. Pepi, A. Ricci, M. Rosi, C. Salvitti, G. de Petris; *Chem. Commun.*, 2014, 50, 13900-13903. **(Co-Corresponding Author)**
Hot paper
due Highlights: 1- **Chemistry World Royal Society of Chemistry** (7 October 2014) 2- **Chemical & Engineering News** 2014, 92, 30
DOI: 10.1039/c4cc05217j
IF = 6,834 – citazioni: 1

Part XI– Complete list of Publications and Congresses

Elenco completo delle pubblicazioni

Banca dati di riferimento: Scopus (aggiornato al 1 ottobre 2019; pubblicazione P1 non ancora comparsa su Scopus);

Impact factor calcolato in base all’anno di pubblicazione (banca dati di riferimento: InCites Journal Citation Reports)

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

- SU1) “Gas-phase structures and thermochemical properties of protonated 5-HMF isomers”, S. Garzoli, L. Antonini, A. Troiani, C. Salvitti, P. Giacomello, A. Patsilnakos, R. Ragno, F. Pepi; *Int. J. Mass Spectrom.*, submitted
- P1) “Base-Assisted Conversion of Protonated D-Fructose to 5-HMF: Searching for Gas-Phase Green Models”, A. Troiani, G. de Petris, F. Pepi, S. Garzoli, C. Salvitti, M. Rosi, A. Ricci; *ChemistryOpen*, **2019**, 8, 1190–1198. **(Co-Corresponding Author)** (non ancora comparsa su Scopus)
DOI:10.1002/open.201900173 IF = 2,2
- P2) (S1) “Gas-Phase Reactivity of Carbonate Ions with Sulfur Dioxide: An Experimental Study of Clusters Reactions”, A. Troiani, C. Salvitti, G. de Petris; *J. Amer. Chem. Soc. Mass Spectrom.*, **2019**, **(Co-Corresponding Author)**
DOI:10.1007/s13361-019-02228-0; first online: 8/7/2019. IF = 3,202
- P3) (S2) “Effective redox reactions by chromium oxide anions: Sulfur dioxide oxidation in the gas phase”, A. Troiani, M. Rosi, S. Garzoli, C. Salvitti, G. de Petris; *Int. J. Mass Spectrom.*, **2019**, 436, 18-22. **(Co-Corresponding Author)**
DOI:10.1016/j.ijms.2018.11.009 IF = 1,658
- P4) (S3) “From ascorbic acid to furan derivatives: the gas phase acid catalyzed degradation of vitamin C”, P. Cimino, A. Troiani, F. Pepi, S. Garzoli, C. Salvitti, B. Di Rienzo, V. Barone, A. Ricci; *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2018**, 20, 17132-17140.
DOI: 10.1039/c8cp01893f IF = 3,567
- P5) (S4) “Sulphur dioxide cooperation in hydrolysis reactions of vanadium oxide and hydroxide cluster dianions”, A. Troiani, M. Rosi, S. Garzoli, C. Salvitti, G. de Petris; *New J. Chem.*, **2018**, 42, 4008-4016. **(back Cover Article; Co-Corresponding Author)**
DOI: 10.1039/c7nj05011a IF = 3,069
- P6) (S5) “Formation of Mono Oxo Molybdenum(IV) PNP Pincer Complexes: Interplay between Water and Molecular Oxygen”, S. R. M. M. de Aguiar, O. Oztopcu, A. Troiani, G. de Petris, M. Weil, B. Stoger, E. Pittenauer, G. Allmaier, L. F. Veiros, K. Kirchner; *Eur. J. Inorg. Chem.* **2018**, 876–884.
DOI: 10.1002/ejic.201701413 IF = 2,578
- P7) “Ab-initio and experimental study of pentose sugar dehydration mechanism in the gas phase” L. Antonini, S. Garzoli, A. Ricci, A. Troiani, C. Salvitti, P. Giacomello, R. Ragno, A. Patsilnakos, B. Di Rienzo, F. Pepi; *Carbohydrate Research*, **2018**, 459-458, 19-28.
DOI:10.1016/j.carres.2018.01.007 IF = 1,873
- P8) (S6) “Vanadium Hydroxide Cluster Ions in the Gas Phase: Bond-Forming Reactions of Doubly-Charged Negative Ions by SO₂-Promoted V-O Activation” A. Troiani, M. Rosi, S. Garzoli, C. Salvitti, G. de Petris; *Chem. Eur. J.* **2017**, 23, 11752-11756. **(inside Cover Article; Co-Corresponding Author)**
DOI: 10.1002/chem.201702165 IF = 5,16

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

- P9) (S7) "Vitamin C: an experimental and theoretical study on the gas-phase structure and ion energetics of protonated ascorbic acid", A. Ricci, F. Pepi, P. Cimino, A. Troiani, S. Garzoli, C. Salvitti, B. Di Rienzo, V. Barone; *J. Mass Spectrom.* **2016**, 51, 1146–1151
DOI 10.1002/jms.3848 IF = 2,381
- P10) (S8) "Iron-Promoted C-C Bond Formation in the Gas Phase", A. Troiani, M. Rosi, S. Garzoli, C. Salvitti, G. de Petris; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 14359–14362. **(Co-Corresponding Author)**
DOI: 10.1002/anie.201506932 IF = 11,709
- P11) (S9) "A mass spectrometric study of the acid-catalysed D-fructose dehydration in the gas phase", F. Pepi, A. Ricci, S. Garzoli, A. Troiani, C. Salvitti, B. Di Rienzo, P. Giacomello; *Carbohydrate Research* **2015**, 413, 145-150.
DOI: 10.1016/j.carres.2015.05.013 IF = 1,817
- P12) (S10) "Acid-catalysed glucose dehydration in the gas phase: a mass spectrometric approach", A. Ricci, B. Di Rienzo, F. Pepi, A. Troiani, S. Garzoli, P. Giacomello; *J. Mass Spectrom.* **2015**, 50, 228-234.
DOI 10.1002/jms.3525 IF = 2,541
- P13) (S11) "The oxidation of sulfur dioxide by single and double oxygen transfer paths", A. Troiani, M. Rosi, C. Salvitti, G. de Petris; *ChemPhysChem*, **2014**, 15, 2723-2731. **(Co-Corresponding Author)**
DOI: 10.1002/cphc.201402306 IF = 3,419
- P14) (S12) "All the 2p-block elements in a molecule: experimental and theoretical studies of FBNCO and FBNCO", A. Troiani, S. Garzoli, F. Pepi, A. Ricci, M. Rosi, C. Salvitti, G. de Petris; *Chem. Commun.*, **2014**, 50, 13900-13903. **(Co-Corresponding Author)** ((Hot paper e due Highlights in: **Chemistry World Royal Society of Chemistry** (7 October 2014) ed in **Chemical & Engineering News** 2014, 92, 30)
DOI: 10.1039/c4cc05217j IF = 6,834
- P15) "Selective activation of C-Cl and C-F bonds by SO⁺ radical cations: an experimental and computational study", G. de Petris, A. Troiani, M. Rosi, G. Angelini, O. Ursini, *ChemPlusChem*, **2013**, 78, 1065-1072. **(Corresponding Author)**
DOI: 10.1002/cplu.201300162 IF = 3,242
- P16) "Mechanistic aspects of gas-phase hydrogen-atom transfer from methane to [CO]⁺ and [SiO]⁺: Why do they differ?" N. Dietl, A. Troiani, M. Schlangen, O. Ursini, G. Angelini, Y. Apeloig, G. de Petris, H. Schwarz, *Chem. Eur. J.*, **2013**, 16, 6234-6242.
DOI: 10.1002/chem.201204157. IF = 5.696
- P17) "The oxidative mechanism in the electrophilic C-H bond activation: the case of CH₂F₂ and CH₂Cl₂", G. de Petris, O. Ursini, M. Rosi, A. Troiani, *Chemistry-An Asian Journal*, **2013**, 8, 588-595.
DOI: 10.1002/asia.201201028 IF = 3,935

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. **2633/2019** del **05/09/2019**

Codice Concorso **2019PAR022**

- P18) “Linking ion and neutral chemistry in c-h bond electrophilic activation: generation and detection of HO₂· reactive radicals in the gas phase”, G. de Petris, G. Angelini, O. Ursini, M. Rosi, A. Troiani, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2012**, 51, 1455-1458. **(Hot paper)**
DOI: 10.1002/anie.20110 IF = 13,734
- P19) “The Azido Oxide, N₃O” G. de Petris, A. Troiani, M. Rosi, A. Sgamellotti, R. Cipollini, *Chemical Physics*, **2012**, 398, 129- 133. **(Corresponding Author)**
DOI:10.1016/j.chemphys.2011.06.026 IF = 1,957
- P20) “The proton affinity and gas-phase basicity of Sulfur Dioxide”, G. de Petris, A. Cartoni, M. Rosi, V. Barone, C. Puzzarini, A. Troiani., *ChemPhysChem*, **2011**, 12, 112-115. **(Cover article)**
DOI: 10.1002/cphc.201000920 IF = 3,412
- P21) “Double C-H activation of Ethane by metal-free SO₂⁺ radical cations”, G. de Petris, A. Cartoni, A. Troiani, V. Barone, P. Cimino, G. Angelini, O. Ursini, *Chem. Eur. J.*, **2010**, 16, 6234-6242.
DOI: 10.1002/chem.200903588 IF = 5,476
- P22) “Water activation by SO₂⁺ ions: an effective source of OH radicals”, G. de Petris, A. Cartoni, A. Troiani, G. Angelini, O. Ursini, *PhysChemChemPhys*, **2009**, 11, 9976-9978.
DOI: 10.1039/b915123k IF = 4,116
- P23) “Experimental and theoretical evidence for HS₄⁻”, G. de Petris, A. Cartoni, R. Cipollini, M. Rosi, A. Troiani, *J. Phys. Chem. A*, **2009**, 113, 14420-14423.
DOI: 10.1021/jp9036556 IF = 2,899
- P24) “Sodium Glycodeoxycholate and Glycocholate mixed aggregates in gas and solution phases”, G. de Petris, M. R. Festa, L. Galantini, E. Giglio, C. Leggio, N. V. Pavel, A. Troiani, *J. Phys. Chem. B*, **2009**, 113, 7162-7169. **(Corresponding Author)**
DOI: 10.1021/jp9010586 IF = 3,471
- P25) “Methane activation by metal-free radical cations: experimental insight into the reaction intermediate”, G. de Petris, A. Troiani, M. Rosi, G. Angelini, O. Ursini, *Chem. Eur. J.*, **2009**, 15, 4248-4252. **(Highlight in “News and Views”, Nature Chemistry, (2009), 1, (5), 348-349)**
DOI: 10.1002/chem.200802581 IF = 5,382
- P26) “The HSSS radical and the HSSS⁻ anion”, G. de Petris, A. Cartoni, M. Rosi, A. Troiani, *J. Phys. Chem. A*, **2008**, 112, 8471-8477.
DOI: 10.1021/jp8055637 IF = 2,872
- P27) “Isotope effects in isotope-exchange reactions: evidence for a large ¹²C/¹³C kinetic isotope effect in the gas phase”, G. de Petris, A. Troiani, *J. Phys. Chem. A*, **2008**, 112, 2507-2510.
DOI: 10.1021/jp710634p IF = 2,872
- P28) “Ionization of Carbonyl Sulphide/Disulphur Monoxide mixtures in atmospheric gases: a theoretical study of the formation of S₃O⁺ ions”, M. Rosi, G. de Petris, A. Troiani, *THEOCHEM*, **2007**, 822(1-3), 153-157.

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. **2633/2019** del **05/09/2019**

Codice Concorso **2019PAR022**

DOI:10.1016/j.theochem.2007.08.002 IF = 1,112

- P29) “Isotope exchange in Disulfur Monoxide-Water charged complexes: a mass spectrometric and computational study”, G. de Petris, A. Troiani, G. Angelini, O. Ursini, A. Bottoni, M. Calvaresi, *J. Amer. Chem. Soc. Mass Spectrom.*, **2007**, 18, 1664-1671.

DOI:10.1016/j.jasms.2007.06.012 IF = 3,664

- P30) “SSOH and HSSO radicals: an experimental and theoretical study of $[S_2OH]^{0/+/-}$ species”, G. de Petris, M. Rosi, A. Troiani, *J. Phys. Chem. A*, **2007**, 111, 6526-6533.

DOI: 10.1021/jp072025r IF = 2918

- P31) “ $H_2O_2^+$ ions in ionized O_2/CH_4 mixtures: intermediacy of CH_3OOH^+ and CH_2O^+ ”, G. de Petris, S. Garzoli, A. Troiani, *Chem. Phys. Lett.*, **2007**, 435, 219-223.

DOI:10.1016/j.cplett.2006.12.090 IF = 2,207

- P32) “ S_3O and S_3O^+ in the gas phase: ring and open-chain structures”, G. de Petris, M. Rosi, A. Troiani, *Chem. Comm.*, **2006**, 42, 4416-4418.

DOI: 10.1039/b609646h IF = 4,521

- P33) “Direct experimental observation of CS_2OH^+ ”, G. de Petris, M. Rosi, A. Troiani, *ChemPhysChem*, **2006**, 7, 2352-2357.

DOI: 10.1002/cphc.200600515 IF = 3,449

- P34) “A novel route to $H_2O_2^+$ ions via direct generation of the Oxywater cation H_2OO^+ ”, G. de Petris, R. Cipollini, A. Cartoni, A. Troiani, *Int. J. Mass Spect.*, **2006**, 249-250, 311-316.

DOI:10.1016/j.ijms.2005.12.010 IF = 2,337

- P35) “ CS_2O^+ and CS_2O in the gas phase: an experimental and computational study”, G. de Petris, M. Rosi, A. Troiani, *J. Chem. Phys.*, **2005**, 123, 164307/1-164307/9.

DOI: 10.1063/1.2065207 IF = 3,138

- P36) “Ionization of Carbon Disulfide/Ozone mixtures in atmospheric gases”, G. de Petris, A. Cartoni, M. Rosi, A. Troiani, *Chem. Phys. Lett.*, **2005**, 410, 377-383.

DOI: 10.1016/j.cplett.2005.05.095 IF = 2,438

- P37) “What ion is generated when ionizing Acetonitrile?”, G. de Petris, S. Fornarini, M. E. Crestoni, A. Troiani, P. M. Mayer, *J. Phys. Chem. A*, **2005**, 109, 4425-4427.

DOI: 10.1021/jp051484u IF = 2,898

- P38) “Experimental detection of theoretically predicted N_2CO ”, G. de Petris, F. Cacace, R. Cipollini, A. Cartoni, M. Rosi, A. Troiani, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2005**, 44, 462-465.

DOI: 10.1002/anie.200460310 IF = 9,596

- P39) “Isotope exchange in ionised CO_2/CO mixtures: the role of asymmetrical $C_2O_3^+$ ions”, G. de Petris, A. Cartoni, M. Rosi, A. Troiani, G. Angelini, O. Ursini, *Chem. Eur. J.*, **2004**, 10, 6411-6421.

DOI: 10.1002/chem.200400483 IF = 4,517

- P40) “Discovery of the new metastable HONF radical”, F. Cacace, G. de Petris, M. Rosi, A. Troiani,

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

ChemPhysChem, **2004**, 5, 503-508.

DOI: 10.1002/cphc.200400020 IF = 2,2073,596

- P41) “Discovery of two high-energy N₂O₂ isomers”, F. Cacace, G. de Petris, A. Troiani, *Chem. Commun.*, **2004**, 3, 326-327.

DOI: 10.1039/b312628e IF = 3,997

- P42) “Experimental detection of the H₂NO₃ radical”, F. Cacace, G. de Petris, A. Troiani, *ChemPhysChem*, **2003**, 4, 1128-1131. **(Cover article)**

DOI: 10.1002/cphc.200300849 IF = 3,316

- P43) “Carbon Tetraoxide: theoretically predicted and experimentally detected”, F. Cacace, G. de Petris, M. Rosi, A. Troiani, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2003**, 42, 2985-2990.

DOI: 10.1002/anie.200350936 IF = 8,427

- P44) “The impervious route to the elusive HOOO⁻ anion”, F. Cacace, R. Cipollini, G. de Petris, A. Troiani, *Int. J. Mass Spect.*, **2003**, 228, 717-722.

DOI:10.1016/S1387-3806(03)00213-6 IF = 2,361

- P45) “Charged and neutral NO₃ isomers from the ionization of NO_x and O₃ mixtures”, F. Cacace, G. de Petris, M. Rosi, A. Troiani, *Chem. Eur. J.*, **2002**, 8, 5684-5693.

DOI: 10.1002/chem.200390125 IF = 4,238

- P46) “Formation of O₃⁺ upon ionization of O₂. The role of isomeric O₄⁺ complexes”, F. Cacace, G. de Petris, M. Rosi, A. Troiani, *Chem. Eur. J.*, **2002**, 8, 3653-3659.

DOI: 10.1002/1521-3765(20020816)8:16<3653::AID-CHEM3653>3.0.CO;2-1 IF = 4,238

- P47) “Bile salt aggregates in the gas phase: an electrospray ionization mass spectrometric study”, F. Cacace, G. de Petris, E. Giglio, F. Punzo, A. Troiani, *Chem. Eur. J.*, **2002**, 8, 1925-1933.

DOI: 10.1002/1521-3765(20020415)8:8<1925::AID-CHEM1925>3.0.CO;2-X IF = 4,238

- P48) “Experimental detection of Tetranitrogen”, F. Cacace, G. de Petris, A. Troiani, *Science*, **2002**, 295, 480-481. **(Chemistry Highlights 2002, in Chemical & Engineering News V. 80, No. 50, 42-43).**

DOI: 10.1126/science.1067681 IF = 26,682

- P49) “S₃O, a new Sulfur Oxide identified in the gas phase” F. Cacace, G. de Petris, M. Rosi, A. Troiani, *Chem. Commun.*, **2001**, 2086-2087.

DOI: 10.1039/b104329n IF = 3,902

- P50) “Experimental detection of Tetraoxygen”, F. Cacace, G. de Petris, A. Troiani, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2001**, 40, 4062-4065. **(Due Highlights: 1- “News about Oxygen”, Angew. Chem. Int. Ed. 2002, 41, 573; 2- “New form of oxygen found”, Nature News, 2001, DOI:10.1038/news011122-3)**

DOI: 10.1002/1521-3773(20011105)40:21<4062::AID-ANIE4062>3.0.CO;2-X IF = 8,255

- P51) “Ionization of O₃ in excess N₂. A new route to N₂O via intermediate [N₂O₃]⁺ complexes”, F. Cacace, G. de Petris, M. Rosi, A. Troiani, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2001**, 40, 1938-1941. **(press release in Angewandte Chemie Int. Ed. n. 10/2001)**

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. **2633/2019** del **05/09/2019**

Codice Concorso **2019PAR022**

- DOI: 10.1002/1521-3773(20010817)40:16<2947::AID-ANIE44442947>3.0.CO;2-P IF = 8,255
- P52) “A New Sulfur Oxide, OSOSO, and its cation, likely present in the Io’s atmosphere: detection and characterization by mass spectrometric and theoretical methods”, F. Cacace, R. Cipollini, G. de Petris, M. Rosi, A. Troiani, *J. Am. Chem. Soc.*, **2001**, 123, 478-484.
DOI: 10.1021/ja002533d IF = 6,079
- P53) “Ionization of atmospheric gases containing Ozone and Carbonyl Sulfide. Formation and reactivity of SO⁺ ions”, F. Cacace, G. de Petris, M. Rosi, A. Troiani, *J. Phys. Chem. A*, **2001**, 105, 1144-49.
DOI: 10.1021/jp003656n IF = 2,63
- P54) “Ionization of Ozone/Chlorofluorocarbon mixtures in atmospheric gases: formation and remarkable dissociation of [CHXYO₃]⁺ complexes (X = H, Cl, F; Y = Cl, F)”, F. Cacace, G. de Petris, F. Pepi, M. Rosi, A. Troiani, *Chem. Eur. J.*, **2000**, 6, 2572-81.
DOI: 10.1002/1521-3765(20000717)6:14<2572::AID-CHEM2572>3.0.CO;2-P IF = 4.698
- P55) “Direct experimental evidence for the H₂O⁺O₂⁻ charge transfer complex: crucial support to atmospheric photonucleation theory”, F. Cacace, G. de Petris, F. Pepi, A. Troiani, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2000**, 39, 367-369.
DOI: 10.1002/(SICI)1521-3773(20000117)39:2<367::AID-ANIE367>3.0.CO;2-I IF = 8,547
- P56) “Gas-phase reactions of nitronium ions with Acetylene and Ethylene: An experimental and theoretical study”, F. Bernardi, F. Cacace, G. de Petris, F. Pepi, I. Rossi, A. Troiani, *Chem. Eur. J.*, **2000**, 6, 537-544.
DOI: 10.1002/(SICI)1521-3765(20000204)6:3<537::AID-CHEM537>3.0.CO;2-I IF = 4,698
- P57) “Isomeric Cl₂O₂⁺ and Cl₂O₂⁻ ions”, F. Cacace, G. de Petris, A. Troiani, *Rapid Comm. in Mass Spectrom.* **1999**, 13,1903-1906.
DOI:10.1002/(SICI)1097-0231(19991015)13:19<1903::AID-RCM727>3.0.CO;2-R IF = 2,437
- P58) “Experimental detection of Hydrogen Trioxide”, F. Cacace, G. de Petris, F. Pepi, A. Troiani, *Science*, **1999**, 285, 81-82.
DOI: 10.1126/science.285.5424.81 IF = 24,595
- P59) “Gaseous [H₃C-Cl-Cl]⁺ Ions from the reaction of Methane with Cl₃⁺, the first example of a new dihalogenation process. Formation and characterization of CH₃Cl₂⁺ isomers by experimental and theoretical methods”, F. Cacace, G. de Petris, F. Pepi, M. Rosi, A. Troiani, *Chem. Eur. J.*, **1999**, 5, 2750-55.
DOI: 10.1002/(SICI)1521-3765(19990903)5:9<2750::AID-CHEM2750>3.0.CO;2-T IF = 4,814
- P60) “Gaseous trihalogen cations. Formation, structure and reactivity of Cl₃⁺ and Cl₂F⁺ ions from a joint ab initio and FT-ICR study”, F. Cacace, G. de Petris, F. Pepi, M. Rosi, A. Troiani, *J. Phys. Chem A* **1999**, 103, 2128-33.
DOI: 10.1021/jp9841079 IF = 2,695

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. **2633/2019** del **05/09/2019**

Codice Concorso **2019PAR022**

- P61) "Regio- and stereochemistry of gas-phase acid-induced nucleophilic substitutions on chiral allylic alcohols", M. Speranza, A. Troiani, *J. Org. Chem.*, **1998**, 63, 1020-26.
DOI : 10.1021/jo971283p IF = 3,5
- P62) "Intracomplex CH₃OH walking around optically active 1-methyl-3-ethylallyl cations. A gas-phase kinetic study", A. Troiani, M. Speranza, *J. Org. Chem.*, **1998**, 63, 1012-19.
DOI: 10.1021/jo971282x IF = 3,5
- P63) "Mechanisms and stereochemistry of acid-induced ring-opening of optically active 1,2-propene oxides in the gas phase", A. Troiani, A. Filippi, M. Speranza, *Chem. Eur. J.*, **1997**, 36, 1729-31.
DOI: 10.1002/chem.19970031223 IF = 4,828
- P64) "KrOn⁺ (n=1, 2) and KrOHn⁺ are stable species in the gas phase", A. Filippi, A. Troiani, M. Speranza, *Chem. Phys. Lett.*, **1997**, 278, 202-8.
DOI: 10.1016/S0009-2614(97)01002-6 IF = 2,441
- P65) "XeO⁺ and XeOH⁺ ions: a new class of powerful oxidative oxygenating agents in the gas phase", A. Filippi, A. Troiani, M. Speranza, *J. Phys. Chem. A* **1997**, 101(49), 9344-50.
DOI: 10.1021/jp9718818 IF = 3,392 (IF di Journal of Physical Chemistry)
- P66) "Gas-phase enantiodifferentiation of chiral molecules. Chiral recognition of 1-phenyl-1-propanol/2-butanol clusters by resonance enhanced multiphoton ionization spectroscopy", S. Piccirillo, C. Bosman, D. Toja, A. Giardini-Guidoni, M. Pierini, A. Troiani, M. Speranza, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **1997**, 36, 1729-31.
DOI: 10.1002/anie.199717291 IF = 8,56
- P67) "Chiral ions in the gas-phase. 1. Intramolecular racemization and isomerization of O-protonated (S)-*trans*-4-hexen-3-ol", A. Troiani, F. Grandinetti, F. Gasparrini, M. Speranza, *J. Amer. Chem. Soc.*, **1997**, 119, 4525.
DOI: 10.1021/ja960212p IF = 5,65
- P68) "Probing gaseous ion-molecule complexes with chiral agents: the reaction of arenium ions with (R)-(-)-*s*-butyl chloride", M. Aschi, F. Cacace, A. Troiani, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **1997**, 36, 83.
DOI: 10.1002/anie.199700831 IF = 8,56

Partecipazione a Congressi

- 1) Sulfur dioxide uptake by sodium carbonate anions in the gas phase. C. Salvitti, A. Troiani, G. de Petris, XXII International Mass Spectrometry Conference, Firenze - 26-31/8 2018 (*poster*)
- 2) Gas phase structures and thermochemical parameters of protonated 5-HMF isomers. F. Pepi, S. Garzoli, P. Giacomello, G. de Petris, A. Troiani, R. Ragno, A. Patsilinakos, L. Antonini, A. Ricci, C. Salvitti, XXII International Mass Spectrometry Conference, Firenze - 26-31/8 2018 (*poster*)

Anna TROIANI - CV

Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. 2633/2019 del 05/09/2019

Codice Concorso 2019PAR022

- 3) Selective conversion of protonated D-fructose to 5-HMF and 2-FA: a nitrogen-base assisted dehydration process in the gas-phase. A. Troiani, G. de Petris, F. Pepi, D. Garzoli, M. Rosi, A. Ricci, C. Salvitti, XXII International Mass Spectrometry Conference, Firenze - 26-31/8 2018 (*poster*)
- 4) Two molecules are better than one: cooperative effects of two sulphur dioxide and sulphur dioxide/water in bond forming and hydrolysis reactions of polyvanadate dianions in the gas phase. A. Troiani, M. Rosi, S. Garzoli, C. Salvitti, G. de Petris, XXII International Mass Spectrometry Conference, Firenze - 26-31/8 2018 (*poster*)
- 5) Gas phase basicity and proton affinity of Vitamin C. A. Ricci, F. Pepi, P. Cimino, A. Troiani, S. Garzoli, C. Salvitti, B. Di Renzo, V. Barone, Congresso Nazionale della Divisione di Spettrometria di Massa-MASSA 2016, Roma - 6-8/9 2016 (*poster*)
- 6) Reaction of $[(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\text{-M}]^+$ (M = Mn, Fe, Co) with dichloromethane in the gas-phase: C-C bond formation and production of MCl_2 . A. Troiani, M. Rosi, S. Garzoli, C. Salvitti, G. de Petris, 21th International Mass Spectrometry Conference 2016, Toronto (Canada)- 20-26/8 2016 (*poster*)
- 7) Reactivity and structure of isolated ionic and neutral gaseous species of fundamental and multidisciplinary interest. G. de Petris, P. Giacomello, S. Garzoli, F. Pepi, C. Salvitti, A. Troiani; Workshop sulla Ricerca – Dipartimento Chimica e Tecnologie del Farmaco Università degli Studi di Roma “La Sapienza” – 21 settembre 2015 (*oral*)
- 8) Oxygen atom transfer reaction from oxyhalogenated anions to carbon monoxide. A. Troiani, Third EuCheMS Inorganic Chemistry Conference: Chemistry over the horizon 2015, Wroclaw (Poland), 28/6 – 1/7 2015. (*poster*)
- 9) Experimental detection of metastable N_3O . A. Troiani, R. Cipollini, M. Rosi, A. Sgamellotti, G. de Petris, Chemical physics of low temperature plasmas (Symposium in Honour of Prof. Mario Capitelli) 31/1 – 1/2 2011, Bari. (*oral*)
- 10) Double C-H activation of ethane by metal-free SO_2^+ radical cations. Troiani, Anna; DE PETRIS, Giulia; Cartoni, Antonella; V., Barone; P., Cimino; G., Angelini; O., Ursini, 3rd EuCheMS Chemistry Congress. Chemistry - the Creative Force, 29/8 - 2/9 2010, Nürnberg (Germany) (*poster*)
- 11) SSOH and HSSO Radicals: An Experimental and Theoretical Study of $[\text{S}_2\text{OH}]^{0/+/-}$ Species. G de Petris, M. Rosi, A. Troiani, XXXV Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana, 3-7/9 2007 Milano. (*poster*)
- 12) Ionization of carbon disulfide/ozone mixtures in atmospheric gases. G. de Petris, A. Cartoni, M., Rosi, A. Troiani, Massa 2005 - An International Symposium on Mass Spectrometry, Università del Sacro Cuore di Gesù, 28/6 – 1/7 2005 Roma (*poster*)

Anna TROIANI - CV

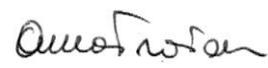
Procedura valutativa per la copertura di n. 1 posto di Professore Universitario di II fascia per il Settore concorsuale 03/B2 – Settore scientifico disciplinare CHIM/07 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco – Facoltà di Farmacia e Medicina.

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n. **2633/2019** del **05/09/2019**

Codice Concorso **2019PAR022**

- 13) The CS_2O^+ ion and its neutral counterpart in the gas phase: an experimental and computational study. G. de Petris, M., Rosi, A. Troiani, Massa 2005 - An International Symposium on Mass Spectrometry, Università del Sacro Cuore di Gesù, 28/6 – 1/7 2005 Roma (*oral*)
- 14) Atmospherically relevant ion processes and neutral species. G. de Petris, A. Cartoni, R. Cipollini, A. Troiani, Conferenza sulla Ricerca Scientifica della Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Roma “La Sapienza”. 9-10/12/2004 Roma (*oral*)
- 15) Ionization of ozone/chlorofluorocarbon mixtures in atmospheric gases: Formation and remarkable dissociation of $[\text{CHXYO}_3]^{(+)}$ complexes (X = H, Cl, F ; Y = Cl, F). A. Troiani, F. Cacace, G. de Petris, XV International Mass Spectrometry Conference, 27/8 – 1/9 2000, Barcelona (Spain) (*poster*)

Roma, 1 ottobre 2019


Anna Troiani