



## CURRICULUM VITAE ET STUDIORUM

### INFORMAZIONI PERSONALI

---

Nome e Cognome: **CHIARA SALVITTI**

E-mail: [chiara.salvitti@uniroma1.it](mailto:chiara.salvitti@uniroma1.it)

Nazionalità: ITALIANA

### ESPERIENZA PROFESSIONALE

---

**2022-** RICERCATORE (RTDA)

**SSD:** CHIM/03

**PROGETTO:** *“Conversione di biomassa e di gas serra in prodotti ad elevato valore aggiunto: studi sperimentali mediante metodologie avanzate”*

**RESPONSABILE:** Prof.ssa Anna Troiani

Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università degli studi di Roma “La Sapienza”

**2020-2022** ASSEGNISTA DI RICERCA

**SSD:** CHIM/03

**PROGETTO:** *“Modelli sperimentali in fase gassosa di processi complessi di interesse biologico ed ambientale”*

**RESPONSABILE:** Prof.ssa Anna Troiani

Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università degli studi di Roma “La Sapienza”

- 1 -

**2019-2020** ASSEGNISTA DI RICERCA

**SSD:** CHIM/03

**PROGETTO:** *“Studi cinetici e termodinamici in fase gassosa di reazioni ione-molecola su sistemi ionici semplici quali modelli di processi complessi”*

**RESPONSABILE:** Prof.ssa Anna Troiani

Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università degli studi di Roma “La Sapienza”

**2018-2019** ASSEGNISTA DI RICERCA

**SSD:** CHIM/03

**PROGETTO:** *“Studi cinetici e termodinamici in fase gassosa su sistemi ionici semplici quali modelli di processi chimici industriali”*

**RESPONSABILE:** Prof.ssa Giulia de Petris

Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università degli studi di Roma “La Sapienza”

**2016** VISITING STUDENT



(01/08-31/12) **PROGETTO:** *“Structural analysis of oxocarbenium ions using gas-phase infrared spectroscopy”*

**RESPONSABILE:** Prof. Kevin Pagel

Institute of Chemistry and Biochemistry, Freie Universität Berlin

Department of Molecular Physics, Fritz Haber Institute Berlin

#### **2014 BORSISTA**

(01/07-31/07) **PROGETTO:** *“Studio e sviluppo di metodi di estrazione e analisi GC/MS e HPLC/MS di composti solforati mediante liquidi ionici”*

**RESPONSABILE:** Prof. Pierluigi Giacomello

Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università degli studi di Roma “La Sapienza”

#### **2013-2014 FREQUENTATORE SCIENTIFICO**

**PROGETTO:** *“Decomposizione delle biomasse: Studio del meccanismo di disidratazione acido catalizzata degli zuccheri in fase gassosa mediante tecniche spettrometriche di massa”*

**RESPONSABILE:** Prof. Federico Pepi, Prof.ssa Giulia de Petris

Dipartimento di Chimica e Tecnologie del farmaco, Università degli studi di Roma “La Sapienza”

#### **2012-2013 TESISTA**

**PROGETTO:** *“Studio del ruolo del liquido ionico BMIMBF<sub>4</sub> nell’esterificazione ossidativa di aldeidi aromatiche”*

**RESPONSABILE:** Prof.ssa Isabella Chiarotto

Dipartimento di Scienze di base e applicate per l’Ingegneria, Università degli studi di Roma “La Sapienza”

- 2 -

#### **2011 TIROCINANTE**

(01/10-31/04) U.O.C. Farmacia interna, Policlinico di Roma “Umberto I”

### **ESPERIENZA DIDATTICA**

---

#### **2019-2020 SEMINARIO**

(a.a 2019-20) **TITOLO:** *“Il sistema periodico: Passato, presente e futuro”*

**INSEGNAMENTO:** Chimica

**CORSO DI LAUREA:** Ingegneria Energetica, Università degli studi di Roma “La Sapienza”

**INSEGNAMENTO:** Chimica Analitica e Complementi di Chimica Generale ed Inorganica

**CORSO DI LAUREA:** Farmacia, Università degli studi di Roma “La Sapienza”

#### **2015-2018 TUTOR**

(a.a 2015-16) **INSEGNAMENTO:** Chimica (SSD CHIM/07)

2016-17 **CORSI DI LAUREA:** Ingegneria Aerospaziale, Ingegneria Elettrotecnica, Ingegneria

-Autorizzo il trattamento dei dati personali ai sensi dell’art. 13 del GDPR 679/16-



2017-18) Energetica, Ingegneria Chimica, Ingegneria Civile  
Università degli studi di Roma "La Sapienza"

**2010-2012 TUTOR**

(a.a 2010-11 **INSEGNAMENTO:** Chimica medica (SSD BIO/10)

2011-12) **CORSI DI LAUREA:** Odontoiatria e Protesi dentaria  
Università degli studi di Roma "La Sapienza"

**INSEGNAMENTO:** Chimica e propedeutica Biochimica (SSD BIO/10)

**CORSI DI LAUREA:** Medicina e Chirurgia  
Università degli studi di Roma "La Sapienza"

**2014- TUTOR TESI SPERIMENTALI**

**Marta Managò**, Laurea in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche (a. a. 2019-2020)

*"Modifica di una sorgente a ionizzazione elettrospray per lo studio di reazioni accelerate in microgocce cariche"*

**Claudia Renzi**, Laurea in Farmacia (a. a. 2019-2020)

*"Caratterizzazione strutturale di proteine redox mediante soft landing atmosferica ed analisi voltammetrica"*

**Federica Di Legge**, Laurea in Farmacia (a. a. 2016-2017)

*"Reattività di clusters dianionici di ossido ed idrossido di vanadio"*

**Gianluca Ferrigno**, Laurea in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche (a. a. 2016-2017)

*"Studio del meccanismo di disidratazione in fase gassosa di zuccheri pentosi mediante spettrometria di massa"*

**Rossella Hanieh**, Laurea in Farmacia (a. a. 2015-2016)

*"Formazione di legami C-C in plasmi di metallocene in fase gassosa"*

**Andrea Tuccio**, Laurea in Farmacia (a. a. 2015-2016)

*"Studio della decomposizione acido catalizzata dello xilosio in fase gassosa"*

**Anna Regina Del Manso**, Laurea in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche (a. a. 2015-2016)

*"Decomposizione delle biomasse: Studio del meccanismo di disidratazione acido-catalizzata del fruttosio in fase gassosa"*

**Fabrizio Mosca**, Laurea in Farmacia (a. a. 2014-2015)

*"Decomposizione delle biomasse: Studio del meccanismo di disidratazione acido-catalizzata del glucosio in fase gassosa"*



## ISTRUZIONE E FORMAZIONE

---

### 2020 MASTER DI I LIVELLO

(19/11/2020) Diploma di Master di I livello in LA CONSULENZA PEDAGOGICA NEI CONTESTI EDUCATIVI DI FORMAZIONE PERMANENTE

Università degli studi di Roma "Niccolò Cusano"

**VOTAZIONE:** 105/110

**RELATORE:** Prof.ssa Cristiana Cardinali

**TITOLO DELLA TESI:** *"Progettazione di un percorso e-learning per l'acquisizione delle conoscenze e delle abilità richieste per l'accesso programmato ai Corsi di Laurea in Medicina, Odontoiatria e Veterinaria"*

### 2020 CORSO DI PERFEZIONAMENTO

(08/05/2020) Percorso formativo per il conseguimento dei 24 Crediti Formativi Universitari (CFU) nelle discipline antropo-psico-pedagogiche e nelle metodologie e tecnologie didattiche (D.M. 616/2017)

Università degli studi di Roma "Niccolò Cusano"

### 2017 DOTTORATO DI RICERCA

(19/12/2017) PhD in SCIENZE FARMACEUTICHE (con titolo di "Doctor Europaeus")

Università degli studi di Roma "La Sapienza"

**VOTAZIONE:** Ottimo/Ottimo

**TUTOR:** Prof. Federico Pepi

**TITOLO DELLA TESI:** *"A gas-phase approach to the study of reaction mechanisms of biological and industrial sustainable processes"*

- 4 -

### 2016 CORSO DI PERFEZIONAMENTO

(18/03/2016) XX corso di SPETTROMETRIA DI MASSA, Società Chimica Italiana (SCI)

Università degli studi di Siena

### 2013 ABILITAZIONE PROFESSIONALE

(12/12/2013) Esame di abilitazione alla professione di Farmacista

Università degli studi di Roma "La Sapienza"

**VOTAZIONE:** 300/350

### 2013 LAUREA SPECIALISTICA A CICLO UNICO

(23/07/2013) Diploma di Laurea in FARMACIA

Facoltà di Farmacia e Medicina, Università degli studi di Roma "La Sapienza"

**VOTAZIONE:** 110 e lode/110 (media degli esami: 29.8)

**RELATORE:** Prof. Federico Pepi

**CORRELATORE:** Prof.ssa Isabella Chiarotto

**TITOLO DELLA TESI:** *"Esterificazione ossidativa di aldeidi aromatiche, etero-aromatiche ed alifatiche via intermedio di Breslow in liquido ionico"*

### 2007 DIPLOMA DI SCUOLA MEDIA SUPERIORE

-Autorizzo il trattamento dei dati personali ai sensi dell'art. 13 del GDPR 679/16-



(07/07/2007) Maturità classica  
Liceo "Lucio Anneo Seneca"  
**VOTAZIONE:** 100/100

## FINANZIAMENTI

---

- Vincitrice del finanziamento di "**Avvio alla ricerca**" tipo 2 (2.200 euro) per il progetto di ricerca dal titolo "*Progettazione di liquidi ionici task-specific e studio del meccanismo catalitico mediante tecniche spettrometriche di massa*". Anno accademico 2021/2022.  
Università degli studi di Roma "La Sapienza"
- Vincitrice del finanziamento di "**Avvio alla ricerca**" tipo 2 (2.000 euro) per il progetto di ricerca dal titolo "*Reattività in fase gassosa di addotti ionici contenenti metalli quali modelli di ossidazione eterogenea ed enzimatica*". Anno accademico 2019/2020.  
Università degli studi di Roma "La Sapienza"
- Vincitrice del finanziamento di "**Avvio alla ricerca**" tipo 2 (2.015 euro) per il progetto di ricerca dal titolo "*Studi in fase gassosa su sistemi ionici semplici quali modelli di processi chimici industriali: formazione di Platform dalla biomassa*". Anno accademico 2018/2019.  
Università degli studi di Roma "La Sapienza"
- Vincitrice del finanziamento di "**Avvio alla ricerca**" tipo 1 (1.000 euro) per il progetto dal titolo "*Caratterizzazione di miscele di isomeri di carboidrati semplici e complessi mediante spettrometria di massa a mobilità ionica (IM-MS)*". Anno accademico 2016/2017.  
Università degli studi di Roma "La Sapienza"

- 5 -

---

## PREMI E RICONOSCIMENTI

---

- Vincitrice del premio "**Laureato Eccellente**" per l'anno accademico 2012/13 messo in palio dalla Fondazione Alumni NoiSapienza.  
Università degli studi di Roma "La Sapienza"
- Vincitrice di una borsa di partecipazione al XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana messa in palio dalla Divisione di Chimica Inorganica
- Vincitrice di una borsa di partecipazione al XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana messa in palio dalla Divisione di Spettrometria di massa
- Vincitrice senza borsa del concorso di dottorato in Scienze Farmaceutiche XXIX ciclo.  
Università degli studi di Roma "La Sapienza"
- FRONT COVER su New Journal of Chemistry 2021, vol. 45 per la pubblicazione dal titolo



*"The Knoevenagel reaction catalysed by ionic liquids: a mass spectrometric insight into the reaction mechanism"*

(DOI: 10.1039/D1NJ03594K)

- INSIDE COVER su ChemPlusChem 2021, vol. 86 per la pubblicazione dal titolo  
*"Charge-tagged N-heterocyclic carbenes (NHCs): revealing the hidden side of the NHC-catalysed reactions through electrospray ionization mass spectrometry"*  
(DOI: 10.1002/cplu.202000656)
- BACK COVER su New Journal of Chemistry 2018, vol. 42 per la pubblicazione dal titolo  
*"Sulphur dioxide cooperation in hydrolysis reactions of vanadium oxide and hydroxide cluster dianions"*  
(DOI: 10.1039/c7nj05011a)
- INSIDE COVER su Chemistry-A European Journal 2017, vol. 23 per la pubblicazione dal titolo  
*"Vanadium hydroxide cluster ions in the gas phase: bond-forming reactions of doubly-charged negative ions by SO<sub>2</sub>-promoted V-O activation"*  
(DOI: 10.1002/chem.201702165)
- HOT PAPER e 2 HIGHLIGHTS:  
1- Chemistry World Royal Society of Chemistry (7 October 2014)  
2- Chemical & Engineering News 2014, 92, 30  
per la pubblicazione dal titolo  
*"All the 2p-block elements in a molecule: experimental and theoretical studies of FBNCO and FBNCO<sup>+</sup>"* (DOI: 10.1039/c4cc05217j)

- 6 -

## COMUNICAZIONI A CONVEGNI

---

- 2021** SCI 2021  
XXVII CONGRESSO NAZIONALE DELLA SOCIETÀ CHIMICA ITALIANA  
On-line  
Comunicazione orale, vincitrice di borsa (Divisione di chimica inorganica)  
*"Redox reactivity of transition metal dioxide anions towards sulfur dioxide in the gas phase"*
- 2021** AICIng 2021  
XII CONGRESSO DELL'ASSOCIAZIONE ITALIANA DI CHIMICA PER L'INGEGNERIA  
Reggio Calabria (Italia)  
Comunicazione orale  
*"La condensazione di Knoevenagel catalizzata da liquidi ionici imidazolici: studio del meccanismo di reazione mediante spettrometria di massa"*
- 2021** 9<sup>th</sup> MS J Day (2<sup>ND</sup> Online edition)  
Comunicazione orale



*"Accelerated dehydration of D-fructose performed in microdroplets by a commercial ESI Z-spray source"*

**2020** MASSA 2020-VIP (Virtual International Pre-congress)

Comunicazione orale

*"The Knoevenagel condensation catalyzed by task-specific ionic liquids: a gas-phase study to highlight the reaction mechanism"*

**2019** IYPT2019-ANNO INTERNAZIONALE DELLA TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI CHIMICI A LATINA

Liceo Scientifico "G. B. Grassi", Latina (Italia)

Comunicazione orale su invito

*"Il sistema periodico: passato, presente e futuro"*

**2018** XXII INTERNATIONAL MASS SPECTROMETRY CONFERENCE

Firenze (Italia)

Comunicazione poster

*"Sulfur dioxide uptake by sodium carbonate anions in the gas phase"*

**2017** 8th BeMM SYMPOSIUM

Roma (Italia)

Comunicazione poster

*"The route from D-Fructose to 5-Hydrumethylfuraldehyde: a new base-assisted dehydration mechanism"*

- 7 -

XXVI CONGRESSO NAZIONALE DELLA SOCIETÀ CHIMICA ITALIANA

Paestum (SA, Italia), vincitrice di borsa (Divisione di spettrometria di massa)

Comunicazione orale

*"Selective gas-phase conversion of D-fructose to 5-hydroxymethylfuraldehyde through a base-assisted dehydration process"*

**2015** MASSA 2015

Alghero (SS, Italia)

Comunicazione poster

*"Inside the mechanism of acid-catalysed D-fructose dehydration: a mass spectrometric study"*

## COMPETENZE SCIENTIFICHE

---

- Esperienza nell'impiego di tecniche strumentali di spettrometria di massa (IT, MALDI-TOF, TQ, Q-TOF, ZABSPEC-oaTOF) e metodi di ionizzazione del campione (EI, CI, ESI, APCI, MALDI).



- Esperienza nella modifica di spettrometri di massa commerciali (trappole ioniche e triplo quadrupolo) per esperimenti di reattività IONE-MOLECOLA ed ION LANDING (SOFT-IL, AMBIENT-IL e REACTIVE-IL), nonché per studi di accelerazione di reazioni chimiche in MICROGOCCE CARICHE.
- Esperienza nell'utilizzo di uno spettrometro di massa magnetico multi-settore per lo studio della chimica dei neutri in fase gassosa (NEUTRALIZATION-REIONIZATION MS).
- Esperienza nella manipolazione di LIQUIDI IONICI come solventi e catalizzatori di reazione.
- Buona esperienza nell'impiego di tecniche spettrometriche e spettroscopiche per la caratterizzazione strutturale di specie ioniche in fase gassosa (ION MOBILITY e ULTRA-COLD SPECTROSCOPY).
- Conoscenza ed utilizzo della SPETTROSCOPIA DI RISONANZA MAGNETICA NUCLEARE (NMR) per l'identificazione di prodotti di reazione.
- Conoscenza ed utilizzo di tecniche di estrazione, purificazione e separazione del campione (THIN LAYER CHROMATOGRAPHY, PAPER e COLUMN CHROMATOGRAPHY), nonché di tecniche voltammetriche (VOLTAMMETRIA CICLICA E LINEARE).
- Competenze generali nell'impiego di apparecchiature laser (FREE ELECTRON, ND: YAG e DYE LASER).
- Conoscenza del pacchetto Microsoft Office (EXCEL, POWER POINT, WORD), programmi di elaborazioni dati (SCIDAVIS, ORIGIN, DYNAFIT), grafica molecolare (CHEMDRAW, CHEMSKETCH e MARVIN) e softwares di controllo strumentali THERMOFISHER, BRUKER e WATERS.
- Capacità di navigare sul web e realizzare ricerche bibliografiche utilizzando databases scientifici (SCOPUS, SCIFINDER, SCIENCE DIRECT e REAXYS).

- 8 -

## COMPETENZE LINGUISTICHE

---

- Italiano: Lingua madre
- Inglese: B2

## INTERESSI DI RICERCA

---

L'attività di ricerca svolta si colloca nell'ambito della chimica ionica in fase gassosa studiata mediante l'utilizzo di tecniche spettrometriche di massa avanzate. In questo campo, l'interesse scientifico della candidata è principalmente rivolto a **(i)** l'indagine dei meccanismi di reazione di





processi chimici di interesse industriale ed a **(ii)** lo studio di reattività e struttura di specie ioniche, anche contenenti metalli, quali modelli di processi chimici atmosferici.

Per quanto riguarda la linea di ricerca **(i)**, particolare attenzione è stata riservata alle reazioni di disidratazione di monosaccaridi ottenuti da processi di decomposizione termica delle biomasse lignocellulosiche. Attualmente, infatti, il progressivo esaurimento delle riserve petrolifere e la crescente sensibilizzazione a problematiche ambientali quali l'inquinamento ed i cambiamenti climatici hanno reso necessaria la pianificazione di strategie mirate all'utilizzo di risorse energetiche alternative e rinnovabili. In quest'ottica le biomasse lignocellulosiche rappresentano la principale fonte di carbonio esistente sulla terra e possono essere impiegate direttamente come carburanti "green" o come fonte di composti organici semplici e molecole piattaforma coinvolti nella sintesi di una grande varietà di specie chimiche e farmaceutiche a struttura furanica. In particolare, la 5-idrossimetilfuraldeide (5-HMF), la furaldeide (FA) e l'acido levulinico (LA) sono i prodotti della disidratazione acido-catalizzata di zuccheri esosi (glucosio) e pentosi (xilosio) che costituiscono i "building blocks" dei principali polimeri, cellulosa ed emicellulosa, presenti nelle biomasse lignee. In fase gassosa, numerosi studi teorici hanno ipotizzato possibili vie di conversione del glucosio e dello xilosio rispettivamente a 5-HMF e FA, mentre in soluzione la carenza di dati sperimentali è principalmente ascrivibile all'instabilità degli intermedi di reazione, che ne impedisce l'isolamento e l'identificazione. Una conoscenza approfondita dei meccanismi di reazione consente, quindi, di incrementare la selettività dei processi in esame e di aumentare le rese del prodotto finale di reazione, diminuendo quelle dei sottoprodotti di decomposizione. A questo scopo, anche in considerazione della natura ionica delle specie coinvolte nella reazione di disidratazione, l'approccio combinato di spettrometria di massa e calcoli teorici si è rivelato efficace per identificare i precursori carichi della reazione, caratterizzare strutturalmente gli intermedi ed i prodotti ionici ed ottenere infine informazioni meccanicistiche utili a chiarire possibili vie catalitiche preferenziali. Lo stesso approccio sperimentale è stato applicato con successo allo studio delle reazioni di disidratazione di zuccheri strutturalmente correlati al glucosio ed allo xilosio (fruttosio, ribosio e arabinosio) ed all'indagine dei processi di decomposizione dell'acido ascorbico, Vitamina C, largamente presente in frutta e verdura o utilizzato come conservante in numerosi alimenti. A questo riguardo, secondo quanto riportato dall'Agenzia Internazionale di Ricerca sul Cancro (IARC), diversi studi scientifici identificano nell'acido ascorbico la principale fonte di composti furanici potenzialmente cancerogeni per l'uomo. La conoscenza dettagliata degli intermedi e del meccanismo di decomposizione della Vitamina C può, dunque, rivelarsi fondamentale allo scopo di mantenere i livelli di questi composti al di sotto della soglia critica per la salute umana. L'attività di ricerca, svolta dalla candidata nell'ambito delle suddette problematiche e documentata dalla sua produzione scientifica (in particolar modo dalle pubblicazioni **7, 8, 11, 13, 16 e 19**), ha permesso di maturare competenze nell'impiego di svariate tecniche di spettrometria di massa (Trappola ionica, Triplo quadrupolo, Q-TOF, MALDI-TOF) e diversi metodi di ionizzazione del campione (ESI, APCI, Matrix-assisted laser desorption/ionization) applicati a studi strutturali e termochimici di specie cariche in fase gassosa. La candidata ha per di più contribuito a modificare una sorgente ESI commerciale per adattarla ad esperimenti di soft landing ambientale ed allo studio di fenomeni di accelerazione di reazioni organiche in microgocce cariche (pubblicazione **3**).

Per quanto riguarda invece la linea di ricerca **(ii)**, documentata dalle pubblicazioni **1, 4, 9, 10, 12, 14, 18 e 21**, la candidata si è principalmente occupata dello studio di reattività e struttura di specie ioniche semplici. In quest'ambito la candidata ha utilizzato una trappola ionica appositamente



modificata per studi cinetici di reazioni ione-molecola e misura di costanti di velocità. Particolare interesse è stato rivolto all'indagine dei processi di ossidazione della  $\text{SO}_2$  a  $\text{SO}_3$  e suoi derivati (pubblicazioni **1**, **4**, **9**, **10** e **21**) che rappresentano lo step principale per la conversione del diossido di zolfo ad acido solforico. In questo contesto la ricerca di reazioni di ossidazione efficaci può contribuire a migliorare i metodi di produzione industriale di acido solforico oppure a ridurre le emissioni di  $\text{SO}_2$  responsabili dell'inquinamento atmosferico e delle piogge acide. A tal proposito, infatti, ossidi a base di metalli di transizione costituiscono la componente attiva del particolato atmosferico ed al contempo vengono largamente impiegati in ambito industriale come catalizzatori di reazione. Secondo alcuni studi condotti in soluzione, le proprietà ossidanti di questi composti possono ascrivere alla formazione di un radicale anionico dell'ossigeno sulla superficie del sito catalitico, benché la comprensione dell'esatto meccanismo di reazione sia complicata in soluzione dalla presenza di molecole di solvente e controioni che contribuiscono a mascherare le proprietà intrinseche dei siti attivi. Studi in fase gassosa permettono, invece, di prescindere dai cosiddetti fattori al contorno e di accedere al livello strettamente molecolare di una reazione chimica. Tale approccio consente di valutare in un ambiente controllato l'effetto di una serie di proprietà chimiche, come carica, spin e stechiometria, sulla reattività di una specie carica. È stato, dunque, possibile studiare l'effetto delle dimensioni e della stechiometria di clusters carichi a base di carbonato nei confronti della  $\text{SO}_2$  (pubblicazione **9**) e di valutare l'effetto della distribuzione della carica e dello spin sulle proprietà ossidanti di una serie di anioni contenenti metalli di transizione (pubblicazioni **4** e **10**). Analogamente, lo studio di specie cariche a base di metalli di transizione, come ferro e vanadio, può rivelarsi utile anche quale modello cinetico di reazioni mai osservate prima. Ad esempio, lo ione  $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\text{Fe}^+$  ottenuto dal ferrocene ha mostrato una reattività inusuale nei confronti del diclorometano, dando luogo ad una reazione di coupling carbonio-carbonio nella quale il ferro svolge un ruolo chiave (pubblicazione **18**). Gli anioni doppiamente carichi contenenti vanadio,  $\text{H}_2\text{V}_2\text{O}_7^{2-}$  e  $\text{HNaV}_4\text{O}_{12}^{2-}$ , invece, si sono rivelati reattivi nei confronti della  $\text{SO}_2$ , dando luogo ad una reazione di formazione di legame e separazione di carica conseguente all'attivazione del legame V-O promossa dal diossido di zolfo (pubblicazione **14**).

Nell'ambito, inoltre, di una internship di cinque mesi presso il Fritz Haber Institute di Berlino, la candidata ha acquisito buone conoscenze nell'utilizzo di tecniche spettrometriche di massa più strettamente legate alla caratterizzazione strutturale di specie cariche in fase gassosa, quali l'ion Mobility-MS (già modificata per il calcolo di valori assoluti di collisional cross section) e l'Ultra-Cold Spectroscopy. Durante questa esperienza, lo studio si è principalmente rivolto all'analisi strutturale di ioni oxocarbenici in fase gassosa, quali intermedi chimici della reazione di glicosilazione. In particolare, la spettrometria di massa a mobilità ionica ha consentito di separare molecole cariche aventi lo stesso rapporto  $m/z$ , ma diverse caratteristiche strutturali e di discriminare ioni isomerici facenti parte di miscele complesse di carboidrati. D'altra parte, la spettroscopia infrarossa ultra-fredda ha permesso un'accurata indagine dei dettagli strutturali degli ioni carbocationici in esame. Questi sono stati imprigionati all'interno di gocce di elio superfluido e raffreddati fino ad una temperatura di circa 0.37 Kelvin. Di conseguenza, la drastica riduzione dei gradi di libertà molecolari ha comportato la diminuzione del numero di conformazioni accessibili, ottenendo spettri infrarossi altamente risolti e caratteristici della struttura più stabile.

Per concludere, durante l'internato di tesi sperimentale presso i laboratori del Dipartimento SBAI dell'Università di Roma "La Sapienza" la candidata ha acquisito buone competenze nell'impiego delle più diffuse tecniche sintetiche, nonché delle procedure, anche strumentali, di estrazione,

-Autorizzo il trattamento dei dati personali ai sensi dell'art. 13 del GDPR 679/16-



separazione ed identificazione dei prodotti di reazione. Scopo del lavoro è stato quello di condurre una reazione di esterificazione ossidativa di aldeidi variamente sostituite ad esteri impiegando il liquido ionico 1-butil-3-metilimidazolio tetrafluoroborato (BMImBF<sub>4</sub>) come precursore del catalizzatore e solvente di reazione. Al fine di soddisfare, nell'ambito della Green Chemistry, la crescente richiesta di strategie sintetiche alternative, economiche ed eco-sostenibili la sostituzione dei solventi organici volatili classici (VOCs) rappresenta infatti un obiettivo auspicabile. Il diffuso utilizzo dei VOCs nella chimica tradizionale è tuttora responsabile di importanti problemi di smaltimento, tossicità ed inquinamento delle falde, comportando un impatto negativo sulla salute umana e sull'equilibrio dell'ecosistema. A questo scopo i liquidi ionici rappresentano delle promettenti alternative in quanto caratterizzati da un elevato potere solvente, una considerevole stabilità chimica, nonché dalla possibilità di essere riciclati. Nel lavoro di tesi della candidata, la reazione di esterificazione è stata catalizzata dal carbene *N*-eterociclico generato per deprotonazione del BMImBF<sub>4</sub> in presenza di una base organica, ottenendo ottime rese di prodotto e dimostrando che il liquido ionico non svolge solo un'azione solvente, ma catalizza il processo mediante un meccanismo di *umpolung* e formazione dell'intermedio di Breslow. Nell'ottica, quindi, di chiarire i meccanismi di reazione di processi catalizzati da liquidi ionici e carbeni *N*-eterociclici, la candidata ha recentemente studiato mediante spettrometria di massa l'effetto del catione e dell'anione di una serie di liquidi ionici imidazolici, anche derivatizzati con un tag carico, sulla catalisi della condensazione di Knoevenagel, una reazione ampiamente utilizzata in ambito chimico per la produzione di farmaci o di intermedi di sintesi (pubblicazione 2).

## INDICATORI BIBLIOMETRICI

- 11 -

Banca dati	Pubblicazioni	Inizio	Fine
Scopus (Author ID: 56215656500)	21	2014	2021

Indicatore	Banca dati	Valore
Impact Factor totale <sup>§</sup>	InCites Journal Citation Reports	69,813
Impact Factor medio <sup>§</sup> per pubblicazione	InCites Journal Citation Reports	3,324
Citazioni totali	Scopus	95
Media citazioni per pubblicazione	Scopus	4,524
Hirsch (H) index	Scopus	7

§ IF relativo all'anno di pubblicazione

## PUBBLICAZIONI

-Autorizzo il trattamento dei dati personali ai sensi dell'art. 13 del GDPR 679/16-



1. *Intracluster sulphur dioxide oxidation by sodium chlorite anions: A mass spectrometric study*, **C. Salvitti**, F. Pepi, A. Troiani, G. de Petris, *Molecules* 2021, 26, 7114 (DOI: 10.3390/molecules26237114), **CO-CORRESPONDING AUTHOR**.  
IF<sub>2020</sub> = 4,412 – citazioni: 0
2. *The Knoevenagel condensation catalysed by ionic liquids: a mass spectrometric insight into the reaction mechanism*, **C. Salvitti**, M. Bortolami, I. Chiarotto, A. Troiani, G. de Petris, *New J. Chem.* 2021, 45, 17787-17795 (DOI: 10.1039/D1NJ03594K), **CO-CORRESPONDING AUTHOR e FRONT COVER**.  
IF<sub>2020</sub> = 3,591 – citazioni: 0
3. *The use of a commercial ESI Z-spray source for ambient ion soft landing and microdroplet reactivity experiments*, **C. Salvitti**, A. Troiani, F. Mazzei, C. D'Agostino, R. Zumpano, C. Baldacchini, A. R. Bizzarri, A. Tata, F. Pepi, *Int. J. Mass Spectrom.* 2021, 468, 116658 (DOI: 10.1016/j.ijms.2021.116658), **CO-CORRESPONDING AUTHOR**.  
IF<sub>2020</sub> = 1,986 – citazioni: 0
4. *Reactivity of transition metal dioxide anions MO<sub>2</sub><sup>-</sup> (M = Co, Ni, Cu, Zn) with sulfur dioxide in the gas phase: An experimental and theoretical study*, **C. Salvitti**, M. Rosi, F. Pepi, A. Troiani, G. de Petris, *Chem. Phys. Lett.* 2021, 776, 138555 (DOI: 10.1016/j.cplett.2021.138555).  
IF<sub>2020</sub> = 2,328 – citazioni: 1
5. *Charge-tagged N-heterocyclic carbenes (NHCs): revealing the hidden side of the NHC-catalysed reactions through electrospray ionization mass spectrometry*, **C. Salvitti**, I. Chiarotto, F. Pepi, A. Troiani, *ChemPlusChem* 2021, 86, 209-223 (DOI: 10.1002/cplu.202000656), **CO-CORRESPONDING AUTHOR e INSIDE COVER**.  
IF<sub>2020</sub> = 2,863 – citazioni: 1
6. *From vacuum to atmospheric pressure: a review of ambient ion soft landing*, A. Tata, **C. Salvitti**, F. Pepi, *Int. J. Mass Spectrom.* 2020, 450, 116309 (DOI: 10.1016/j.ijms.2020.116309).  
IF = 1,986 – citazioni: 1
7. *Gas-phase structures and thermochemical parameters 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.* 2020, 447, 116237 (DOI: 10.1016/j.ijms.2019.116237).  
IF = 1,986 – citazioni: 2



8. *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(9), 1190-1198 (DOI: 10.1002/open.201900173).  
IF = 2,370 – citazioni: 4
9. *Gas-phase reactivity of carbonate ions with sulphur dioxide: an experimental study of cluster reactions*, A. Troiani, **C. Salvitti**, G. de Petris, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* 2019, 30(10), 1964-1972 (DOI: 10.1007/s13361-019-02228-0).  
IF = 3,255 – citazioni: 2
10. *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 (DOI: 10.1016/j.ijms.2018.11.009).  
IF = 2,090 – citazioni: 6
11. *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, *Carbohydr. Res.* 2018, 458-459, 19-28 (DOI: 10.1016/j.carres.2018.01.007).  
IF = 1,873 – citazioni: 8
12. *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 (6), 4008-4016 (DOI: 10.1039/c7nj05011a), **BACK COVER**.  
IF = 3,069 – citazioni: 4
13. *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 (25), 17132-17140 (DOI:10.1039/c8cp01893f).  
IF = 3,567 – citazioni: 10
14. *Vanadium hydroxide cluster ions in the gas phase: bond-forming reactions of doubly-charged negative ions by SO<sub>2</sub>-promoted V-O activation*, A. Troiani, M. Rosi, S. Garzoli, **C. Salvitti**, G. de Petris, *Chem. Eur. J.* 2017, 23 (49), 11752-11756 (DOI:10.1002/chem.201702165), **INSIDE COVER**.  
IF = 5,160 – citazioni: 13
15. *Synthesis and characterization of two new triads with ferrocene and C60 connected by triple bonds to the beta-positions of meso-tetraphenylporphyrin*, F. Limosani, F. Possanza, E. Ciotta, F. Pepi, **C. Salvitti**, P. Tagliatesta, R. Pizzoferrato, *J. Porphyr. Phthalocyanines* 2017, 21 (4-6), 364-370 (DOI:10.1142/S1088424617500286).  
IF = 1,217 – citazioni: 7



16. *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 Renzo, V. Barone, *J. Mass Spectrom.* 2016, 51 (12), 1146-1151 (DOI: 10.1002/jms.3848).  
IF = 2,381 – citazioni: 3
17. *Characterization of naproxen-polymer conjugates for drug-delivery*, G. Forte, I. Chiarotto, I. Giannicchi, M.A. Loreto, A. Martinelli, R. Micci, F. Pepi, S. Rossi, **C. Salvitti**, A. Stringaro, L. Tortora, S. Vecchio Cipriotti, M. Feroci, *J. of Biomater. Sci. Polym. Ed.* 2016, 27 (1), 69-85 (DOI:10.1080/09205063.2015.1108637).  
IF = 1,900 – citazioni: 7
18. *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 (48), 14359-14362 (DOI:10.1002/anie.201506932).  
IF = 11,709 – citazioni: 3
19. *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, *Carbohydr. Res.* 2015, 413, 145-150 (DOI:10.1016/j.carres.2015.05.013).  
IF = 1,817 – citazioni: 14
20. *All the 2p-block elements in a molecule: experimental and theoretical studies of FBNCO and FBNCO<sup>+</sup>*, A. Troiani, S. Garzoli, F. Pepi, A. Ricci, M. Rosi, **C. Salvitti**, G. de Petris, *Chem. Comm.* 2014, 50 (90), 13900-13903 (DOI:10.1039/c4cc05217j), **HOT PAPER e due HIGHLIGHTS**: 1- Chemistry World Royal Society of Chemistry (7 October 2014); 2- Chemical & Engineering News 2014, 92, 30.  
IF = 6,834 – citazioni: 2
21. *The oxidation of sulfur dioxide by single and double oxygen transfer paths*, A. Troiani, M. Rosi, **C. Salvitti**, G. de Petris, *ChemPhysChem* 2014, 15 (13), 2723-2731 (DOI:10.1002/cphc.201402306).  
IF = 3,419 – citazioni: 7

## COLLABORAZIONI

---

Nell'ambito dell'attività di ricerca svolta, la candidata ha collaborato con gruppi di ricerca nazionali ed internazionali:



- Prof. Marzio Rosi  
Università di Perugia
- Prof.ssa Isabella Chiarotto  
Università degli studi di Roma "La Sapienza"
- Prof.ssa Andreina Ricci  
Università della Campania Vanvitelli
- Prof. Kevin Pagel  
Freie Universität di Berlino
- Prof. Vincenzo Barone  
Scuola Normale Superiore di Pisa
- Prof. Pietro Tagliatesta  
Università degli studi di Roma "Tor Vergata"
- Prof. Franco Mazzei  
Università degli studi di Roma "La Sapienza"
- Prof. Rino Ragno  
Università degli studi di Roma "La Sapienza"

#### CONTRIBUTI AD ATTI DI CONVEGNO

---

1. *Redox reactivity of transition metal dioxide anions towards sulfur dioxide in the gas phase*  
**C. Salvitti**, M. Rosi, F. Pepi, A. Troiani, G. de Petris  
Comunicazione orale al XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana 2021  
Online edition, 13-24 Settembre 2021
2. *Mass spectrometry monitoring of organic reactions- a gas-phase study to highlight the reaction mechanism of the Knoevenagel condensation*  
A. Troiani, **C. Salvitti**, G. de Petris, I. Chiarotto  
Comunicazione poster al XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana 2021  
Online edition, 13-24 Settembre 2021
3. *Intracluster sulfur dioxide oxidation in NaClO<sub>2</sub> cluster anions- a mass spectrometric study*  
A. Troiani, **C. Salvitti**, F. Pepi, G. de Petris  
Comunicazione poster al XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana 2021  
Online edition, 13-24 Settembre 2021
4. *La condensazione di Knoevenagel catalizzata da liquidi ionici imidazolici: studio del meccanismo di reazione mediante spettrometria di massa*



**C. Salvitti**, A. Troiani, I. Chiarotto, G. de Petris

Comunicazione orale al XII Congresso Nazionale dell'Associazione Italiana di Chimica per l'Ingegneria  
Reggio Calabria, 5-8 Settembre 2021

5. *Accelerated dehydration of D-fructose performed in microdroplets by a commercial ESI Z-spray source*  
**C. Salvitti**, A. Troiani, F. Pepi  
Comunicazione orale al 9<sup>th</sup> MS J Day  
2<sup>ND</sup> Online edition, 24 Giugno 2021
6. *The Knoevenagel condensation catalyzed by task-specific ionic liquids: a gas-phase study to highlight the reaction mechanism*  
**C. Salvitti**, A. Troiani, I. Chiarotto, G. de Petris  
Comunicazione orale al 1<sup>st</sup> MASSA 2020-VIP  
International Pre-congress, Settembre 2020.
7. *Sulfur dioxide uptake by sodium carbonate anions in the gas phase*  
**C. Salvitti**, A. Troiani, G. de Petris  
Comunicazione poster al XXII International Mass Spectrometry Conference  
Firenze (Italy), 26-31 Agosto 2018.
8. *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. Patsilidakos, L. Antonini, A. Ricci, **C. Salvitti**  
Comunicazione poster al XXII International Mass Spectrometry Conference  
Firenze (Italy), 26-31 Agosto 2018.
9. *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**  
Comunicazione poster al XXII International Mass Spectrometry Conference  
Firenze (Italy), 26-31 Agosto 2018.
10. *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  
Comunicazione poster al XXII International Mass Spectrometry Conference  
Firenze (Italy), 26-31 Agosto 2018.
11. *The route from D-Fructose to 5-Hydroxymethylfuraldehyde: a new base-assisted dehydration mechanism*  
**C. Salvitti**, A. Ricci, F. Pepi, S. Garzoli, A. Troiani, G. de Petris, M. Rosi





Comunicazione poster al 8th BeMM Symposium Biology and Molecular Medicinal PhD School Policlinico Umberto I (Roma), 20 Novembre 2017.

12. *Selective gas-phase conversion of D-fructose to 5-hydroxymethylfuraldehyde through a base-assisted dehydration process*  
**C. Salvitti**, A. Ricci, F. Pepi, S. Garzoli, A. Troiani, G. de Petris, M. Rosi  
Comunicazione orale al XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana 2017 Paestum (SA), 10-14 Settembre 2017.
13. *From ascorbic acid to furan molecules: a theoretical and experimental study on the gas phase acid catalysed degradation of vitamin C*  
A. Ricci, P. Cimino, A. Troiani, F. Pepi, S. Garzoli, **C. Salvitti**, V. Barone  
Comunicazione orale al XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana 2017 Paestum (SA), 10-14 Settembre 2017.
14. *Gas phase pentose sugar dehydration mechanism: an ab-initio and experimental study*  
F. Pepi, A. Ricci, S. Garzoli, A. Troiani, **C. Salvitti**, R. Ragno, A. Patsilnakos, L. Antonini, B. Di Rienzo, P. Giacomello  
Comunicazione Poster alla ASMS-65th Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics Indianapolis (Indiana), 4-8 Giugno 2017.
15. *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  
Comunicazione poster al Congresso Nazionale della Divisione di Spettrometria di Massa-MASSA2016, Roma (RM), 6-8 Settembre 2016.
16. *Reaction of  $[(\eta^5-C_5H_5)-M]^+$  ( $M = Mn, Fe, Co$ ) 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  
Comunicazione poster alla 21<sup>th</sup> International Mass Spectrometry Conference 2016 Toronto (Canada), 20-26 Agosto 2016.
17. *Inside the mechanism of acid-catalysed D-fructose dehydration: a mass spectrometric study*  
F. Pepi, A. Ricci, S. Garzoli, A. Troiani, **C. Salvitti**, B. Di Rienzo, P. Giacomello  
Comunicazione poster al Congresso Nazionale della Divisione di Spettrometria di Massa-MASSA2015 Alghero (SS), 10-12 Giugno 2015.

- 17 -

## EXTRA

---

- Rappresentante degli Assegnisti di ricerca nel Consiglio e nella Giunta del Dipartimento di Chimica e Tecnologie del farmaco (bienni 2018-2020 e 2020-2022, Università di Roma "La Sapienza")



- Young member della Divisione di Chimica Inorganica e della Divisione di Spettrometria di massa, Società Chimica Italiana (SCI)

Roma, 08/02/2022