

# STEFANO DI STEFANO

## Curriculum Vitae

### INDICE

<b>Parte I – Informazioni Generali</b>	pagina 2
<b>Parte II – Istruzione</b>	2
<b>Parte III – Incarichi e Titoli</b>	3
III A – Incarichi e Titoli Accademici	3
III B – Altri Incarichi e Titoli Accademici	3
III C – Incarichi Non Accademici	4
<b>Parte IV – Attività Didattica</b>	5
IV A – Corsi di Insegnamento tenuti in Istituzioni Accademiche	5
IV B – Relatore di Tesi Sperimentali di Laurea Magistrale	6
IV C – Supervisore di tesi di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche	8
IV D – Supervisore di Assegni di Ricerca	8
<b>Parte V - Premi e Riconoscimenti</b>	9
V A – Premi e Riconoscimenti per la Ricerca	9
V B – Premi e Riconoscimenti per la Didattica	9
V C – Note Editoriali di Merito	10
<b>Parte VI - Finanziamenti</b>	11
VI A – Finanziamenti ottenuti come Responsabile (Principal Investigator)	11
VI B – Finanziamenti ottenuti come Partecipante (Investigator)	12
<b>Parte VII – Attività Organizzative e Altri Ruoli Istituzionali</b>	13
<b>Parte VIII – Attività di Revisore (Referee)</b>	14
<b>Parte IX – Attività di Ricerca</b>	15
<b>Parte X – Parametri Numerici Relativi alla Produzione Scientifica</b>	17
<b>Parte XI– Direzione delle attività di un gruppo di ricerca caratterizzato da collaborazioni Internazionali e nazionali</b>	18
XI A Direzione e co-direzione a livello internazionale	18
XI B Direzione e co-direzione a livello nazionale	19
<b>Parte XII – Partecipazione alle attività di un gruppo di ricerca caratterizzato da collaborazioni Internazionali e nazionali</b>	21
XII A Partecipazione a livello internazionale	21
XII B Partecipazione a livello nazionale	22
<b>Parte XIII – Conferenze (Invited Lectures e Presentazioni Orali) e Organizzazione di Congressi</b>	23
<b>Parte – XIV Altre Informazioni</b>	25
<b>Parte – XV Lista completa delle Pubblicazioni</b>	26

# STEFANO DI STEFANO

## Curriculum Vitae

### Parte I – Informazioni Generali

Nome e Cognome	Stefano Di Stefano
Data di nascita	07 / 01 / 1972
Luogo di nascita	Roma
Cittadinanza	Italiana
E-mail	stefano.distefano@uniroma1.it
Lingue	Italiano, Inglese

### Parte II – Istruzione

Tipo	Anno	Istituzione	Note
Maturità Scientifica	1990	L.S. "C. Cavour" di Roma	Votazione: 60 / 60
Laurea in Chimica	1997	Università di Roma La Sapienza	Votazione: 110/110 e Lode
Abilitazione alla Professione di Chimico	1997		
1° classificato al concorso per l'ammissione al Dottorato in Scienze Chimiche XIII ciclo (1997-2000) all'Università di Roma "La Sapienza"	1997-2000	Università di Roma La Sapienza	
<b>Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche</b>	1/12/2000	Università di Roma La Sapienza	Titolo della tesi di Dottorato: <i>Supramolecular Catalysts for Amide and Ester Cleavage</i>

### Parte III – Incarichi e Titoli

#### III A – Incarichi e Titoli Accademici

Inizio	Fine	Istituzione	Posizione
2001	2005	Università di Roma La Sapienza	Contratti di collaborazione scientifica annuali
2005	2006	Università di Roma La Sapienza	Borsa di studio annuale per una ricerca dal titolo “Formazione di recettori macrociclici in condizioni dinamiche”
2006	2007	Università di Roma La Sapienza	Contratto di collaborazione scientifica semestrale
2006		Università di Roma La Sapienza	1° classificato al concorso per 2 posti di “Ricercatore Universitario” in Chimica Organica (CHIM/06) tenutosi i giorni 5, 6 e 7 dicembre 2006.
2007	2010	Università di Roma La Sapienza	Ricercatore Universitario
2010	2019	Università di Roma La Sapienza	Ricercatore Universitario Confermato
2017	2023		Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di “Professore di II fascia”, settore concorsuale 03/C1, SSD CHIM/06.
2018		Università di Roma La Sapienza	Vincitore di un concorso per la posizione di Professore Associato di Chimica Organica (CHIM/06), tenutosi il 4 giugno 2018.
<b>2019</b>	<b>oggi</b>	<b>Università di Roma La Sapienza</b>	<b>Professore Associato di Chimica Organica (CHIM/06).</b>
2020	2029		Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di “Professore di I fascia”, settore concorsuale 03/C1, Chimica Organica (conseguita il 17/01/2020).

#### III B – Altri Incarichi e Titoli Accademici

Inizio	Fine	Istituzione	Posizione
Marzo 2000	Aprile 2000	Universidad Autonoma de Madrid, Spagna (laboratori del Prof. Javier de Mendoza)	Studiante Visitatore (PhD). Missione finanziata dal CNR con una borsa di studio nell’ambito del programma “Short Term Mobility” e dal COST D11 con una borsa di studio nell’ambito del programma “Short Term Mission” di un progetto europeo sulla Chimica Supramolecolare
Ottobre 2002	Ottobre 2002	Albrecht-Christian Universität di Kiel, Germania (laboratori del Prof. Ulrich Lüning)	Ricercatore Visitatore. Missione finanziata dal COST D11 nell’ambito del programma “Short Term Mission” di un progetto europeo sulla Chimica Supramolecolare
2005	2006	Dipartimento di Chimica, Facoltà SS.MM.FF.NN, Università di Roma “La Sapienza”	Vincitore di una borsa di studio per l’assistenza agli studenti dei corsi di Chimica Organica.

Inizio	Fine	Istituzione	Posizione
luglio 2016	Luglio 2016	European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) di Grenoble, France	Scienziato Visitatore. Esecuzione del Progetto: "Structure and reactivity of non-heme high valent iron peroxo complexes"
Febbraio 2018	Febbraio 2018	European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) di Grenoble, France	Scienziato Visitatore. Esecuzione del Progetto: "Following the ms timescale evolution of redox processes in iron catalysts by simultaneous X-ray and UV/Vis absorption spectroscopy"

### III C – Altri Incarichi non Accademici

Inizio	Fine	Istituzione	Posizione
Dicembre 2000	Giugno 2001	Merck Sharp & Dohme	Assunto nel ruolo di Clinical Monitor (attività nel campo della ricerca clinica, fase IV)
2004	2005	CHEMI spa	Consulente Scientifico per una ricerca riguardante polisaccaridi solforati. In particolare il mio contributo ha riguardato l'identificazione di specie molecolari mediante analisi HPLC/HRMS-ESI e HPLC/MS/MS-ESI.
2006	2006	Istituto Biochimico Italiano (IBI)	Consulente Scientifico per l'identificazione di specie molecolari incognite mediante analisi HPLC/MS-ESI.
2010	2011	EDISES (publishing house)	Traduttore dall'inglese all'italiano dei capitoli 24, 25 e 26 del libro di testo "Organic Chemistry" di P. Y. Bruice (2010) per la casa editrice EDISES.
2017	2019	Beaumont Italia s.r.l.	Consulente Scientifico per una ricerca riguardante lo studio di agenti corrosivi per impianti di raffreddamento. In particolare il mio contributo ha riguardato l'esecuzione e l'interpretazione di esperimenti basati sulla spettroscopia NMR e la spettrometria ESI-MS.

## Parte IV – Attività Didattica

### IV A – Corsi di Insegnamento tenuti in Istituzioni Accademiche

Anno	Istituzione	Corso
Anni Accademici: 2005/2006, 2006/2007, 2007/2008, 2008/2009	“Prima Facoltà” of “Medicina e Chirurgia”, Università di Roma La Sapienza	“Chimica degli Alimenti” per la <b>Laurea Triennale</b> di “Dietista” (2 cfu per gli anni accademici 2005/2006, 2006/2007, 2007/2008, e 3 cfu per l’anno accademico 2008/2009)
Anno Accademico: 2006/2007	Facoltà di Scienze, Università di Roma Tor Vergata	“Chimica Organica” per la <b>Laurea Triennale</b> in “Ecologia” (5 cfu)
Anni Accademici: 2009/2010, 2010/2011, 2011/2012	Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali, Università di Roma La Sapienza	“Chimica Organica” per la <b>Laurea Triennale</b> in “Scienze Naturali” (6 cfu)
Anno Accademico: 2016/2017	Scuola di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche, Università di Roma La Sapienza	“Chimica Supramolecolare” per gli studenti di <b>Dottorato di Ricerca</b> in Scienze Chimiche (6 cfu)
Anni Accademici: 2012/2013, 2013/2014, 2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019, 2019/2020, 2020/2021, 2021/2022	Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali, Università di Roma La Sapienza	“Chimica Organica IV” (9 cfu) per la <b>Laurea Magistrale</b> in “Chimica”
Anni Accademici: 2018/2019, 2019/2020, 2020/2021	Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali, Università di Roma La Sapienza	“Chimica Organica II con Laboratorio” (9 cfu) per la <b>Laurea Triennale</b> in “Chimica”
Anno Accademico: 2021/2022	Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali, Università di Roma La Sapienza	“Chimica Organica II” (6 cfu) per la <b>Laurea Triennale</b> in “Scienze Chimiche”

IV B – **Relatore** di Tesi Sperimentali per la Laurea Magistrale in Chimica svolte presso l' Università di Roma La Sapienza

Anno Accad.	Titolo della Tesi Sperimentale	Studente
2009/2010	<i>Studio di Sistemi di Macrociclicizzazione sotto Controllo Termodinamico</i>	Josè Augusto Berrocal
2009/2010	<i>Sviluppo di nano particelle funzionalizzate con metallo-catalizzatori</i>	Maria Luisa Aufiero
2010 / 2011	<i>La Transamminazione: un versatile strumento di scambio e riconoscimento molecolare?</i>	Maria Ciaccia
2010 / 2011	<i>Studi dinamici combinatori basati sull'inversione di solfossidi</i>	Leonardo Maugeri
2010 / 2011	<i>Sintesi di derivati calix[4]arenici bifunzionali. Reattività intramolecolare di funzioni in posizione 1,3-distale</i>	Marzia Galli
2011 / 2012	<i>Studio degli effetti elettronici e strutturali nell'ossidazione di composti alifatici da parte di complessi non-eme del ferro</i>	Giorgio Olivo
2012 / 2013	<i>Studio delle reazioni di transimminazione e metatesi di immine su substrati aromatici</i>	Silvia Pilati
2012 / 2013	<i>Sintesi di unità monomeriche per polimerizzazioni supramolecolari</i>	Federica Laurenzi
2013 / 2014	<i>Progettazione e sintesi di complessi non-eme del ferro e del manganese per l'ossidazione di legami C-H non attivati</i>	Teresina Ambrosio
2014 / 2015	<i>Meccanismo d'azione di complessi imminici del ferro non eme</i>	Martina Nardi
2014 / 2015	<i>Sintesi e studio del funzionamento di un legante amminico con siti di riconoscimento per la complessazione del ferro (II)</i>	Giulio Farinelli
2014 / 2015	<i>Sintesi di unità monomeriche cicliche per l'ottenimento di aggregati supramolecolari</i>	Simone Albano
2014 / 2015	<i>Formazione statistica di catenani in processi di ciclooligomerizzazione</i>	Francesca Manni
2014 / 2015	<i>Sintesi di Complessi Tetra e Pentadentati del Ferro per Studi di Reattività e Attività Catalitica in Reazioni di Ossidazione</i>	Valeria Dantignana
2015 / 2016	<i>Un carburante per il funzionamento autonomo di macchine molecolari</i>	Chiara Biagini
2015 / 2016	<i>Riconoscimento chirale nella transimminazione di derivati di imminici di calix[4]areni con ammine chirali</i>	Valentina Armiento
2015 / 2016	<i>Utilizzo di un complesso imminico del Fe(II) come catalizzatore dell'ossidazione ecosostenibile della funzione alcolica</i>	Simone Giosia
2015 / 2016	<i>Studio dell'effetto della concatenazione nella formazione di un gel supramolecolare</i>	Alessio Fantozzi
2015 / 2016	<i>Sintesi di carburanti chimici per lo studio di movimenti molecolari</i>	Rachele Caruso
2016 / 2017	<i>Un complesso imminico del ferro, generato in situ da precursori commerciali, catalizza l'ossidazione di legami C-H aromatici</i>	Giorgio Capocasa
2017 / 2018	<i>Rilascio fotoindotto di un carburante chimico per macchine molecolari acido-base</i>	Flaminia Di Pietri

2017/2018	<i>Sintesi parziale di un catalizzatore supramolecolare per C-H ossidazioni e dei relativi substrati amminici insature</i>	Simone Restante
2018/2019	<i>Studi di applicabilità di fuel decarbossilativi in sistemi complessi</i>	Flavia Cenesi
2018/2019	<i>Sintesi di un catalizzatore supramolecolare autoassemblante</i>	Federico Fratello
2018/2019	<i>Catalizzatore supramolecolare auto-assemblante per ossidazioni selettive di composti aromatici</i>	Marika Di Berto Mancini
2018/2019	<i>Sintesi e studio di componenti per una macchina molecolare con movimento autonomo</i>	Valerio Cataldi
2018/2019	<i>Studio sul rilascio controllato di fuel chimico per il funzionamento autonomo di switch acido-base</i>	Daniele Del Giudice
2018/2019	<i>Inibitori fotomodulabili per un catalizzatore supramolecolare</i>	Luis Claudio Pantaleone
2018/2019	<i>Studio sull'induzione temporanea di chiralità su bifenili</i>	Gabriele Cianfoni
2019/2020	<i>Controllo della conformazione della struttura calix[4]arenica mediante fuel chimici</i>	Emanuele Spatola
2019/2020	<i>Studio di un organocatalizzatore supramolecolare per la funzionalizzazione di idrocarburi e sintesi di un suo modello</i>	Michela Guida
2019/2020	<i>Studio degli effetti dell'ingombro sterico sulla reattività di un catalizzatore a base di ferro non-eme attivo nelle C-H ossidazioni</i>	Karim Abdel Hady
2020/2021	<i>pH controllabile nel tempo: la decarbossilazione dell'acido nitroacetico permette l'ascesa del pH ad un valore definito</i>	Matteo Valentini
2020/2021	<i>Metodi catalitici per epossidazioni di alcheni e idrossilazioni di legami C-H alifatici</i>	Roberto Taberini
2020/2021	<i>Sintesi di un complesso penta-coordinato del ferro non-eme decorato con un etere corona</i>	Alessandro Fagnano

IV C – **Supervisore** di tesi di **Dottorato di Ricerca** in Scienze Chimiche svolte presso l'Università di Roma La Sapienza

Ciclo	Titolo della tesi di Dottorato di Ricerca	Studente
Ciclo XXVI	<i>Quantitative Features of Intramolecular Reactions</i>	Josè Augusto Berrocal
Ciclo XXVII	<i>Mechanisms and Applications of Imine Chemistry</i>	Maria Ciaccia
Ciclo XXVIII	<i>Nonheme Iron Complexes as Catalysts for Non-activated C-H Oxidation Reactions</i>	Giorgio Olivo
Ciclo XXXI	<i>On Some Adventure in the Field of Supramolecular Chemistry</i>	Simone Albano
Ciclo XXXII	<i>Decarboxylative Fuels for the Operation of Molecular Machines</i>	Chiara Biagini
Ciclo XXXIII	<i>A Supramolecular Approach to Hydrocarbon Functionalization</i>	Giorgio Capocasa
Ciclo XXXV	Attualmente in corso	Daniele Del Giudice
Ciclo XXXV	Attualmente in corso	Federico Fratello
Ciclo XXXVI	Attualmente in corso	Emanuele Spatola
Ciclo XXXVII	Attualmente in corso	Matteo Valentini
Ciclo XXXVII	Attualmente in corso	Alessandro Fagnano

IV D – **Supervisore** di **Assegni di Ricerca** svolti presso l'Università di Roma La Sapienza

Periodo	Titolo del Progetto	Assegnista
2019/2020	<i>Sintesi e studio di catalizzatori supramolecolari per le C-H ossidazioni</i>	Carla Sappino
2021	<i>Catalizzatori supramolecolari per C-H attivazione</i>	Giorgio Olivo



## Parte V - Premi e Riconoscimenti

### V A Premi e Riconoscimenti per la **Ricerca**

Anno	Premio
2020	<b>PREMIO ALLA RICERCA SCIENTIFICA IN CHIMICA ORGANICA NEI SUOI ASPETTI METODOLOGICI</b> per il 2020. Si tratta di un Premio Nazionale assegnato ogni anno dalla Divisione di Chimica Organica della <i>Società Chimica Italiana</i> . La motivazione è stata la seguente: “PER L’ORIGINALITA’ E LA VERSATILITA’ DEI SUOI CONTRIBUTI ALLA CHIMICA SUPRAMOLECOLARE CHE VANNO DALLO STUDIO DEI CARBURANTI ARTIFICIALI PER IL MOVIMENTO DI MACCHINE MOLECOLARI, ALLA CHIMICA DINAMICA COMBINATORIA E ALLA CATALISI A BASE DI COMPLESSI DI FE A MN PER L’OSSIDAZIONE DI SUBSTRATI ORGANICI”. La cerimonia di conferimento del premio si è tenuta il 25 giugno 2021.

### V B Premi e Riconoscimenti per la **Didattica**

Anno	Premio
2014	Premio per l’insegnamento del corso di Chimica Organica IV. Il 19 novembre 2014 ho ricevuto un premio per l’ “ <b>INSEGNAMENTO UNIVERSITARIO ECCELLENTE</b> ” assegnato dal Preside della Facoltà di Scienze dell’Università di Roma La Sapienza per gli insegnamenti impartiti durante l’anno accademico precedente. Il premio è conferito al 5% degli insegnanti della Facoltà che si sono distinti nell’insegnamento. Viene assegnato ogni anno e questa era la <u>prima edizione</u> .
2017	Premio per l’insegnamento del corso di Chimica Organica IV. Il 29 marzo 2017 ho ricevuto un premio per l’ “ <b>INSEGNAMENTO UNIVERSITARIO ECCELLENTE</b> ” assegnato dal Preside della Facoltà di Scienze dell’Università di Roma La Sapienza per gli insegnamenti impartiti durante l’anno accademico precedente. Il premio è conferito al 5% degli insegnanti della Facoltà che si sono distinti nell’insegnamento. Viene assegnato ogni anno e questa era la <u>terza edizione</u> .
2018	Premio per l’insegnamento del corso di Chimica Organica IV. Il 13 dicembre 2018 ho ricevuto un premio per l’ “ <b>INSEGNAMENTO UNIVERSITARIO ECCELLENTE</b> ” assegnato dal Preside della Facoltà di Scienze dell’Università di Roma La Sapienza per gli insegnamenti impartiti durante l’anno accademico precedente. Il premio è conferito al 5% degli insegnanti della Facoltà che si sono distinti nell’insegnamento. Viene assegnato ogni anno e questa era la <u>quinta edizione</u> .
2021	Premio per l’insegnamento dei corsi di Chimica Organica II e di Chimica Organica IV. Il 25 maggio 2021 ho ricevuto un premio per l’ “ <b>INSEGNAMENTO UNIVERSITARIO ECCELLENTE</b> ” assegnato dal Preside della Facoltà di Scienze dell’Università di Roma La Sapienza per gli insegnamenti impartiti durante l’anno accademico precedente (Chimica Organica II e Chimica Organica IV). In questo caso sono stato tra i primi tre docenti più apprezzati della Facoltà e il primo più apprezzato nel Dipartimento di Chimica. Il premio viene assegnato ogni anno e questa era la <u>settima edizione</u> .

Anno	Nota
2017	L'articolo seguente è stato classificato come <b>HOT ARTICLE</b> dall' Editor della rivista <i>Catalysis Science &amp; Technology</i> : "Direct Hydroxylation of Benzene and Aromatics with H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> Catalyzed by a Self-Assembled Iron Complex: Evidence for a Metal-based Mechanism", G. Capocasa, G. Olivo, A. Barbieri, O. Lanzalunga, S. Di Stefano*, <i>Cat. Sci. &amp; Techn.</i> , <b>2017</b> , 7, 5677–5686.
2018	L'articolo seguente è stato inserito nella <b>EDITOR'S CHOICE COLLECTION</b> della rivista <i>Chemical Science</i> : "Variations in the Fuel Structure Control the Rate of the Back and Forth Motions of a Chemically Fuelled Molecular Switch", C. Biagini, S. Albano, R. Caruso, L. Mandolini, J. A. Berrocal, S. Di Stefano*, <i>Chem. Sci.</i> <b>2018</b> , 9, 181-188.
2018	L'articolo seguente è stato classificato come <b>HOT PAPER</b> dall' Editor della rivista <i>Chemistry-A European Journal</i> : "Photoinduced Release of a Chemical Fuel for Acid-Base Operated Molecular Machines", C. Biagini, F. Di Pietri, L. Mandolini, O. Lanzalunga, S. Di Stefano*, <i>Chem. Eur. J.</i> , <b>2018</b> , 24, 10122-10127. Inoltre l'articolo è stato <b>recensito</b> in <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> , <b>2018</b> , 57, 10006-10009.
2019	L'articolo seguente è stato classificato come <b>HOT PAPER</b> dall' Editor della rivista <i>Angewandte Chemie International Edition</i> : "Dissipative Catalysis with a Molecular Machine" C. Biagini, S. D. P. Fielden, D. A. Leigh*, F. Schaufelberger, S. Di Stefano, D. Thomas, <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> , <b>2019</b> , 58, 9876-9880. Inoltre l'articolo ha ricevuto la <b>Prima di Copertina</b> in <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> , ed è risultato essere nella <b>Top Downloaded list del biennio 2018-2019</b> .
2019	L'articolo seguente è stato classificato come <b>HOT ARTICLE</b> dall' Editor della rivista <i>Physical Chemistry Chemical Physics</i> : "The Canonical Behavior of the Entropic Component of Thermodynamic Effective Molarity. An Attempt at Unifying Covalent and Noncovalent Cyclizations" S. Di Stefano*, L. Mandolini*, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> , <b>2019</b> , 21, 955-987.
2020	L'articolo seguente è stato classificato come <b>VERY IMPORTANT PAPER (VIP)</b> dall' Editor della rivista <i>European Journal of Organic Chemistry</i> : "Supramolecular Catalysts Featuring Crown Ethers as Recognition Units" S. Di Stefano*, G. Capocasa, L. Mandolini*, <i>Eur. J. Org. Chem.</i> , <b>2020</b> , 3340–3350.
2020	L'articolo seguente è stato incluso nella <b>HOT ARTICLE COLLECTION</b> dall' Editor della rivista <i>Organic &amp; Biomolecular Chemistry</i> : "Controlling the Liberation Rate of the In Situ Release of a Chemical Fuel for the Operationally Autonomous Motions of Molecular Machines" C. Biagini, G. Capocasa, D. Del Giudice, V. Cataldi, L. Mandolini, S. Di Stefano*, <i>Org. Biomol. Chem.</i> , <b>2020</b> , 18, 3867-3873.
2020	L'articolo seguente è stato classificato come <b>VERY IMPORTANT PAPER (VIP)</b> dall' Editor della rivista <i>Angewandte Chemie International Edition</i> : "Predictable selectivity in remote C-H Oxidation of steroids: analysis of substrate binding mode" G. Olivo*, G. Capocasa, B. Ticconi, O. Lanzalunga, S. Di Stefano*, M. Costas*, <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> , <b>2020</b> , 59, 12703–12708.
2022	L'articolo seguente è stato incluso nella <b>HOT ARTICLE COLLECTION</b> dall' Editor della rivista <i>Organic &amp; Biomolecular Chemistry</i> : "Dissipative Control of the Fluorescence of a 1,3-Dipyrenyl Calix[4]arene in the Cone Conformation" E. Spatola, F. Rispoli, D. Del Giudice, R. Cacciapaglia, A. Casnati, L. Marchiò, L. Baldini*, S. Di Stefano*, <i>Org. Biomol. Chem.</i> , <b>2022</b> , 20, 132–138.

## Parte VI – Finanziamenti

VI A Finanziamenti ottenuti come **Responsabile (Principal Investigator)** della ricerca

Anno	Titolo della Ricerca	Programma	Finanziamento
2008	<i>“Il ruolo del solvente nella struttura e reattività di sistemi dinamici: teoria ed esperimenti”</i>	“Bando per Finanziamento di Ateneo Federato di Scienza e Tecnologia, per giovani ricercatori AST 2008, La Sapienza”	10.000 euro
2009	<i>“Solfossidi in chimica dinamica combinatoria: studi sperimentali e teorici”</i>	“Bando per Finanziamento di Ateneo Federato di Scienza e Tecnologia, AST 2009, La Sapienza”	6.070 euro
2010	<i>“Utilizzo della reazione di metatesi per la verifica della teoria sugli equilibri anello-anello”</i>	“Bando Finanziamento Universitario 2010, La Sapienza”	15.000 euro
2011	<i>“Formazione di basi di Schiff come strumento per il riconoscimento del substrato da parte di catalizzatori supramolecolari basati sulla struttura calixarenica”</i>	“Bando Finanziamento Universitario 2011, La Sapienza”	8.000 euro
2012	<i>“Reazioni di Transimminazione e di Metatesi di Immine in Solventi non Acquosi”</i>	“Bando Finanziamento Universitario 2012, La Sapienza”	2.000 euro
2014	<i>“Studio di Materiali Polimerici Basati su Interazioni Covalenti e Supramolecolari tra Strutture Molecolari Cicliche Interbloccate (Catenani e Rotassani) e non”</i>	“Bando Finanziamento Universitario 2014, La Sapienza”	5.000 euro
2017	-----	“Finanziamento annuale individuale delle attività base di ricerca”, fondo MIUR	3.000 euro
2017-2018	<i>“NMR and ESI TOF analysis of surfactant samples”</i>	Consulente per la Beaumont Italia srl (conto terzi).	15.000 euro
2018	<i>“Non-heme iron and manganese supramolecular catalysts for the oxidation of aliphatic and aromatic C-H bonds”</i>	“Grande Progetto Universitario” nell’ambito del “Bando Ricerca Scientifica - Anno 2018, La Sapienza”, DR n.1349/2018 protocollo n. 43892 del 24/05/2018	54.800 euro
2019	<i>“Controllo del Movimento Autonomo di Macchine Molecolari Acido-Base”</i>	“Bando Finanziamento Universitario 2019, La Sapienza” protocollo n. RP11916B45B22987	4.000 euro
2020	<i>“Macchine Molecolari Basate sulla Struttura Calix[4]arenica”</i>	“Bando Finanziamento Universitario 2020, La Sapienza” n. protocollo RM12017293222D84	15.000 euro

VI B Finanziamenti ottenuti come **Partecipante (Investigator)** alla ricerca

Anno	Titolo della ricerca	Programma	Posizione
1999	<i>“Dispositivi Supramolecolari”</i>	“PRIN 1999” protocollo n. 9903032124_008	Come studente di Dottorato
2006	<i>“Materiali Molecolari per Sensing e Catalisi”</i>	“PRIN 2006” protocollo n. 2006034123_002	Come Borsista
2007	<i>“Materiali Molecolari e Supramolecolari per Sensing e Catalisi”</i>	“Bando Ricerca Scientifica - Anno 2007 La Sapienza”, progetto C26A0798ZX	Come Ricercatore Universitario
2008	<i>“Materiali Molecolari e Supramolecolari per Sensing e Catalisi”</i>	“Bando Ricerca Scientifica - Anno 2008 La Sapienza”, progetto C26A08WZ52	Come Ricercatore Universitario
2008	<i>“Materiali Molecolari e Supramolecolari per Sensing e Catalisi”</i>	“PRIN 2008”, protocollo n. 2008HZJW2L_005	Come Ricercatore Universitario
2009	<i>“Materiali Molecolari e Supramolecolari per Sensing e Catalisi”</i>	“Bando Ricerca Scientifica - Anno 2009, La Sapienza”, progetto C26A092JAL	Come Ricercatore Universitario
2011	<i>“Tecnologie supramolecolari integrate per il trattamento dell'informazione chimica: dispositivi e materiali molecolari avanzati (InfoChem)”</i>	“PRIN 2010-2011” protocollo n. 2010CX2TLM_007	Come Ricercatore Universitario
2015	<i>“Hydrogen Peroxide Activation by Non-Heme Iron Complexes: A Route for Sustainable and Selective Oxidation Processes”</i>	“Grande Progetto Universitario” nell’ambito del “Bando Ricerca Scientifica - Anno 2015, La Sapienza”, progetto C26H159F5B, 30.000 euro	Come Ricercatore Universitario
2016	<i>“Processi Ossidativi Catalizzati da Complessi di Ferro-noneme”</i>	“Bando Ricerca Scientifica - Anno 2016, La Sapienza” progetto RM116154C2F23F40	Come Ricercatore Universitario
2017	<i>“Non-heme iron complexes as efficient and versatile catalysts of oxidative processes”</i>	“Grande Progetto Universitario” nell’ambito del “Bando Ricerca Scientifica - Anno 2017, La Sapienza”, DR n. 2936/2017, 35.000 euro	Come Ricercatore Universitario
2021	<i>“New Supramolecular Catalysts for Selective C-H Bond Functionalization by Hydrogen Atom Transfer (HAT) Based Oxidative Process”</i>	“Grande Progetto Universitario” nell’ambito del “Bando Ricerca Scientifica - Anno 2021, La Sapienza”, protocollo RG12117A5D586DA9, 73.787 euro	Come Professore Associato

## Parte VII – Attività Organizzative e Altri Ruoli Istituzionali

Periodo	Ruolo
dal 27 / 10 /2017 ad oggi	<b>Membro del Collegio dei Docenti del Dottorato in Scienze Chimiche dell' Università di Roma La Sapienza</b>
dal settembre all'ottobre 2015	Membro della Commissione giudicatrice per l'ammissione al Dottorato in Scienze Chimiche (XXXI ciclo) all' Università di Roma La Sapienza
dal 17 / 10 /2017 al 31 /10 /2018	Membro della <b>Commissione Spazi</b> del Dipartimento di Chimica dell' Università di Roma La Sapienza
Dal 26 / 10 /2017 al 24 / 11 /2019	Membro della <b>Commissione Strutture Didattiche e Scientifiche</b> della Facoltà di Scienze dell' Università di Roma La Sapienza
dal 04 / 04 /2019 ad oggi	<b>Presidente</b> della <b>Commissione Biblioteca</b> del Dipartimento di Chimica dell' Università di Roma La Sapienza
dal 25 / 11 /2019 ad oggi	<b>Presidente</b> della <b>Commissione Strutture Didattiche e Scientifiche</b> della Facoltà di Scienze dell' Università di Roma La Sapienza. Questa Commissione amministra i fondi assegnati dall' Ateneo alla Facoltà per molteplici attività svolte nei vari Dipartimenti della Facoltà stessa: dalle borse di studio per studenti di Laurea Triennale, Magistrale e di Dottorato ai fondi per i laboratori didattici. La Commissione gestisce circa 500.000 euro l'anno.
dal 03 / 09 /2021 al 15/10/2021	Membro della Commissione giudicatrice per una procedura selettiva di Professore Associato Settore Concorsuale 03/C1 – SSD CHIM/06 per un posto da coprire presso il Dipartimento di Chimica dell' Università di Roma La Sapienza.
23 / 02 /2022	Presidente della Commissione Nazionale giudicatrice per il conseguimento del Dottorato in Scienze Chimiche (XXXIV ciclo) per tre candidati dell' Università di Roma Torvergata

## Parte VIII – Attività di Revisore (Referee)

Ho svolto attività di revisore per le seguenti Case Editrici (*le riviste per cui ho svolto l'attività di referee sono indicate tra parentesi*):

- AAAS** (*Science, Science Advances*)
- Nature Publishing group** (*Nature Chemistry, Nature Reviews Chemistry*)
- Royal Society of Chemistry** (*Chem. Soc. Rev., Chem. Sci., Chem. Commun., Org. Biomol. Chem., Cat. Sci. & Techn., Dalton Trans., New J. Chem., Green Chemistry, React. Chem. & Eng., Phys. Chem. Chem. Phys., Polym. Chem., Org. Chem. Front.*)
- American Chemical Society** (*J. Am. Chem. Soc., J. Org. Chem., Macromolecules, ACS Catalysis, ACS Macro, Crystal Growth & Design, Ind. Eng. Chem. Res.*)
- Wiley** (*Angew. Chem. Int. Ed., Chem. Eur. J., Chem. Asian J., Asian J. Org. Chem., Eur. J. Org. Chem., Chem. Cat. Chem., Israel J. Chem.; J. Polym. Sci. part A*)
- Elsevier** (*Coord. Chem. Rev., Tetrahedron Lett., J. Molec. Catal. A, Material Today Communications, Polyhedron*)
- Springer** (*Res. Chem. Int.*)
- Taylor and Francis** (*Supramol. Chem.*)
- MDPI** (*Molecules, Symmetry*)

Ho poi svolto attività di revisore per:

- i) ANVUR,
- ii) Dutch Research Council (Paesi Bassi),
- iii) National Science Centre (Polonia)
- iv) Frontier Research in Chemistry (FRC) Foundation (Francia, Università di Strasburgo).

## Parte IX – Attività di Ricerca

Parole chiave

Breve descrizione delle attività di ricerca passate e presenti.

Catalisi Supramolecolare	Molta della mia attività di ricerca ha riguardato le implicazioni chimico organico fisiche della Chimica Supramolecolare. Il mio interesse si è inizialmente focalizzato sulla sintesi e la caratterizzazione meccanicistica di catalizzatori supramolecolari capaci di catalizzare efficientemente e selettivamente la solvolisi di esteri ed ammidi in modo biomimetico. In questi catalizzatori, un sito attivo e un sito di riconoscimento cooperano allo scopo di accelerare la reazione del substrato di interesse. In particolare studiando attentamente gli effetti della complementarità geometrica tra substrato e catalizzatore supramolecolare, abbiamo realizzato prototipi di catalizzatori fotomodulabili e di acetilcolinesterasi artificiali. Inoltre, il confronto tra la reattività intracomplexo con la reattività intermolecolare nei sistemi supramolecolari è stato un lieto motivo in tutti i miei studi sulla catalisi supramolecolare. A riguardo, abbiamo mostrato che il concetto di molarità effettiva (EM) può essere usato per valutare l'efficienza di un gran numero di catalizzatori supramolecolari.
Chimica Supramolecolare	
Chimica Organica	
Meccanismi di Reazione	
Riconoscimento Molecolare	
Reattività Intramolecolare	
Molarità Effettiva	
Chimica Dinamica Combinatoria	La Chimica Dinamica Combinatoria (DCC) è un altro dei miei temi di ricerca. Si tratta di una branca della chimica relativamente recente che studia sistemi complessi in condizioni di equilibrio termodinamico e gli effetti della presenza di entità molecolari chiamate "template" sulla loro composizione. In particolare, la mia investigazione si è focalizzata, prima sugli aspetti teorici di tali sistemi (che si basano principalmente sulla teoria di Jacobson e Stockmayer in quanto, il più delle volte, i sistemi coinvolti nella DCC sono di tipo anello-catena) e poi sull'applicazione dei risultati teorici ad equilibri reali che ho realizzato attraverso reazioni reversibili quali lo scambio di acetali, la metatesi di olefine e la metatesi di immine. Nel caso della metatesi di immine abbiamo anche fatto interessanti e inaspettate scoperte meccanicistiche. Durante lo studio sulla metatesi delle olefine, è stato ottenuto un materiale polimerico che è risultato essere uno dei primi plicatenani main-chain, principalmente costituito da molecole cicliche interbloccate. Alla luce di questi risultati abbiamo riformulato la teoria di Jacobson e Stockmayer in modo da includere nella trattazione anche molecole cicliche interbloccate (catenani).
Teoria di Jacobson e Stockmayer	
Chimica Organica	
Chimica delle Immine	
Metatesi delle Olefine	
Scambio di Acetali	
Catenani Policatenani	
Macchine Molecolari	Ho sviluppato una serie di carburanti chimici (fuel chimici) capaci di guidare, e quindi controllare temporalmente i movimenti di macchine molecolari basate sulla reazione acido-base di Brønsted e le interazioni Host-Guest pH-dipendenti in condizioni dissipative. I fuel sono acidi carbossilici che, dopo aver ceduto il protone alla macchina o all'Host facendoli passare da uno stato A ad uno stato B, decarbossilano per dare specie carbanioniche. Queste ultime sono basi forti capaci di riprendersi il protone dalla forma protonata della macchina o dell'Host, che quindi ritornano allo stato A. In pratica, a parte il fuel iniziale, non c'è bisogno di aggiungere alcun contro-stimolo chimico per completare il ciclo $A \rightarrow B \rightarrow A$ . La struttura chimica dei fuel può essere variata allo scopo di avere un pieno controllo temporale sui movimenti della macchina molecolare e sulle interazioni Host-Guest.
Fuel Chimici	
Chimica Host-Guest	
Controllo Temporale	
Movimenti Molecolari	
Catenani	
Rotassani Sistemi Dissipativi	

## Parole Chiave

## Breve descrizione delle attività di ricerca passate e presenti.

Catalizzatori del Ferro non-eme	Gli studi condotti precedentemente sulla chimiche delle immine sono state di ispirazione per la sintesi one-pot di un complesso imminico del ferro (II) non-eme che si è dimostrato essere un catalizzatore efficiente per l'ossidazione di legami C-H alifatici e aromatici da parte dell' acqua ossigenata. Questo catalizzatore si prepara da precursori disponibili commercialmente a basso costo appena prima dell'uso. Presenta delle proprietà peculiari tra le quali la più interessante è la capacità di ossidare substrati aromatici senza subire de-attivazione. Studi meccanicistici hanno dimostrato che esso opera con un meccanismo metal-based, esente dal coinvolgimento di radicali liberi. Ho sviluppato poi un catalizzatore supramolecolare basato sul noto complesso di White costituito da ferro (II) o manganese (II) tetracoordinati, che ossida efficientemente posizioni metileniche selezionate di lunghe ammine primarie, grazie alla presenza di eteri corona nello scheletro del catalizzatore che consentono il riconoscimento del substrato. Recentemente abbiamo utilizzato questo catalizzatore per ossidare selettivamente substrati di interesse biologico come alcuni derivati del colesterolo. Inoltre abbiamo dimostrato che questo catalizzatore agisce come un enzima artificiale che catalizza la reazione del suo substrato anche in presenza di altri substrati intrinsecamente più reattivi, che, nelle condizioni adottate rimangono praticamente inalterati. La ricerca su catalizzatori non-eme del ferro e del manganese è tutt'oggi uno dei principali temi di ricerca nel mio laboratorio.
Chimica Organica	
Meccanismi di Reazione	
C-H Attivazione	
Catalizzatori Supramolecolari	



## Parte X – Parametri Numerici Relativi alla Produzione Scientifica

		Data Base
Numero totale di pubblicazioni	88 (82+1 articoli e 4+1 capitoli di libro)	<b>Scopus</b> ne riporta <b>86</b> (uno degli articoli è stato pubblicato recentemente e ancora non compare in Scopus, uno dei capitoli di libro non è censito in Scopus)
Numero delle pubblicazioni negli ultimi 10 anni	67 (66+1)	<b>Scopus</b> ne riporta <b>66</b> in quanto un articolo è stato pubblicato recentemente e ancora non vi compare)
H index	<b>24</b>	<b>Scopus</b>
H index negli ultimi 15 anni	<b>22</b>	<b>Scopus</b>
Numero totale di citazioni	<b>1925</b>	<b>Scopus</b>
Numero di citazioni negli ultimi 15 anni (citazioni relative ai lavori pubblicati negli ultimi 15 anni)	<b>1357</b>	<b>Scopus</b>
Numero di citazioni medio per pubblicazione	<b>22.38</b>	Ottenuto come 1925/86 <sup>†</sup>
Impact Factor Totale*	<b>481.45</b>	<b>Journal Citation Reports (JCR)</b>
Impact Factor medio per pubblicazione <sup>*,‡</sup>	<b>5.80</b>	<b>Journal Citation Reports (JCR)</b>

<sup>†</sup> Delle totali 88 pubblicazioni, 2 non sono presenti in Scopus (una perché troppo recente, l'altra perché non censita)

\*Per ogni articolo l' Impact Factor è relativo all'anno di pubblicazione (per le pubblicazioni più recenti, se non ancora disponibile, è stato utilizzato l' Impact Factor dell'anno immediatamente precedente alla pubblicazione).

<sup>‡</sup> Ottenuto come (Impact Factor Totale) / 83 in quanto i capitoli di libro non contribuiscono all' Impact Factor Totale.

**Parte XI – DIREZIONE** delle attività di un gruppo di ricerca caratterizzato da collaborazioni **INTERNAZIONALI e NAZIONALI**.

**XI A Direzione e co-direzione a livello INTERNAZIONALE**

(il/i corresponding author/s è/sono asteriscato/i)

Collaborazione con il gruppo del Prof. E. W. Meijer, Institute for Complex Molecular Systems, University of Eindhoven (The Netherlands):

- 1) “*Copper(I)-Induced Amplification of a [2]catenane in a Virtual Dynamic Library of Macrocyclic Alkenes*” J. A. Berrocal, M. M. L. Nieuwenhuizen, L. Mandolini, E. W. Meijer, S. Di Stefano\*, *Org. Biomol. Chem.*, **2014**, *12*, 6167-6174.
- 2) “*Ring-opening Metathesis Polymerization of a Diolefinic [2]-Catenane-copper(I) Complex: An Easy Route to Polycatenanes*” J. A. Berrocal, L. M. Pitet, M. M. L. Nieuwenhuizen, L. Mandolini, E. W. Meijer\*, S. Di Stefano\*, *Macromolecules*, **2015**, *48*, 1358-1363.

Collaborazione con il gruppo del Prof. C. A. Hunter, Department of Chemistry, University of Sheffield (United Kingdom) e il gruppo della Professoressa L. Baldini dell’ Università di Parma (Italia):

- 1) “*Applications of Dynamic Combinatorial Chemistry for the Determination of Effective Molarity*” M. Ciaccia, I. Tosi, L. Baldini, R. Cacciapaglia, L. Mandolini, S. Di Stefano\*, C. A. Hunter\*, *Chem. Sci.*, **2015**, *6*, 144–151.

Collaborazione con il gruppo del Prof. M. Costas, Departament de Química i Institut de Química Computacional i Catalisi (IQCC), Facultat de Ciències, Universitat de Girona (Spain):

- 1) “*C-H Bond Oxidation Catalyzed by an Imine Based Iron Complex: A Mechanistic Insight*” G. Olivo, M. Nardi, D. Vidal-Sanchez, A. Barbieri, A. Lapi, L. Gómez, O. Lanzalunga, M. Costas\*, S. Di Stefano\*, *Inorg. Chem.*, **2015**, *54*, 10141–10152.
- 2) “*Supramolecular Recognition Allows Remote, Site-Selective C-H Oxidation of Methylenic Sites in Linear Amines*” G. Olivo\*, G. Farinelli, A. Barbieri, O. Lanzalunga, S. Di Stefano\*, M. Costas\*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 16347–16351.
- 3) “*Enzyme-like Substrate-Selectivity in C-H Oxidation Enabled by Recognition*” G. Olivo\*, G. Capocasa, O. Lanzalunga, S. Di Stefano\*, M. Costas\*, *Chem. Comm.*, **2019**, *55*, 917-920.
- 4) “*Predictable selectivity in remote C-H Oxidation of steroids: analysis of substrate binding mode*” G. Olivo\*, G. Capocasa, B. Ticconi, O. Lanzalunga, S. Di Stefano\*, M. Costas\*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 12703–12708. (*Very Important Paper, VIP*)

Collaborazione con il gruppo della Dottoressa Sakura Pascarelli e del Dottor Theyencheri Narayanan, European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble (Fr):

- 1) “*Following a Chemical Reaction on the Millisecond Time Scale by Simultaneous X-ray and UV/Vis Spectroscopy*” G. Olivo, A. Barbieri, V. Dantignana, F. Sessa, V. Migliorati, M. Monte, S. Pascarelli, T. Narayanan, O. Lanzalunga\*, S. Di Stefano\*, P. D’Angelo\*, *J. Phys. Chem. Lett.* **2017**, *8*, 2958–2963.
- 2) “*Coupled X-Ray Absorption/ UV-Vis Monitoring of Fast Oxidation Reactions Involving a Non-Heme Iron Oxo Complex*” G. Capocasa, F. Sessa, F. Tavani, G. Olivo, M. Monte, S. Pascarelli, O. Lanzalunga\*, S. Di Stefano\*, P. D’Angelo\*, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 2299–2304.

Collaborazione con il Dottor J. A. Berrocal, Institute for Complex Molecular Systems, University of Eindhoven (The Netherlands):

- 1) "A CuI-Based Metallo-Supramolecular Gellike Material Built from a Library of Oligomeric Ligands Featuring Exotopic 1,10-Phenanthroline Units" J. A. Berrocal, S. Albano, L. Mandolini, S. Di Stefano\*, *Eur. J. Org. Chem.*, **2015**, 7504–7510.
- 2) "Coupling Decarboxylation of 2-Cyano-2-phenylpropanoic Acid to Large Amplitude Motions: a Convenient Fuel for an Acid-Base Operated Molecular Switch" J. A. Berrocal, C. Biagini, L. Mandolini, S. Di Stefano\*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, 55, 6997–7001.
- 3) "Variations in the Fuel Structure Control the Rate of the Back and Forth Motions of a Chemically Fuelled Molecular Switch" C. Biagini, S. Albano, R. Caruso, L. Mandolini, J. A. Berrocal, S. Di Stefano\*, *Chem. Sci.* **2018**, 9, 181-188.

**XI B Direzione e co-direzione a livello NAZIONALE**  
(il/i corresponding author/s è/sono asteriscato/i)

Collaborazione con il gruppo dei Proff. A. Casnati, L. Baldini e F. Ugozzoli, Università di Parma (Italia):

- 1) "A Highly Efficient Intramolecular Cannizzaro Reaction between 1,3-Distal Formyl Groups at the Upper Rim of a cone-Calix[4]arene" M. Galli, J. A. Berrocal, S. Di Stefano\*, R. Cacciapaglia, L. Mandolini, L. Baldini, A. Casnati, F. Ugozzoli, *Organic and Biomolecular Chemistry*, **2012**, 10, 5109-5012.
- 2) "One-Shot Preparation of an Inherently Chiral Trifunctional Calix[4]arene from an Easily Available Cone-Triformylcalix[4]arene" M. Ciaccia, I. Tosi, R. Cacciapaglia, A. Casnati, L. Baldini\*, S. Di Stefano\*, *Org. Biomol. Chem.*, **2013**, 11, 3642-2648.
- 3) "Naphthalenophane Formaldehyde Acetals as Candidate Structures for the Generation of Dynamic Libraries via Transacetalation Processes" A. Ruggi, R. Cacciapaglia\*, S. Di Stefano\*, E. Bodo, F. Ugozzoli, *Tetrahedron*, **2013**, 69, 2767-2774.
- 4) "Formation of Imidazo[1,5-a]pyridine Derivatives Due to the Action of Fe<sup>2+</sup> on Dynamic Libraries of Imines" S. Albano, G. Olivo, L. Mandolini, C. Massera, F. Ugozzoli, S. Di Stefano\*, *J. Org. Chem.*, **2017**, 82, 3820–3825.
- 5) "Time Programmable Locking/Unlocking of the Calix[4]arene Scaffold by Means of Chemical Fuels" D. Del Giudice, E. Spatola, R. Cacciapaglia, A. Casnati, L. Baldini\*, G. Ercolani\*, S. Di Stefano\*, *Chem. Eur. J.*, **2020**, 26, 14954 – 14962.
- 6) "Dissipative Control of the Fluorescence of a 1,3-Dipyrenyl Calix[4]arene in the Cone Conformation"  
E. Spatola, F. Rispoli, D. Del Giudice, R. Cacciapaglia, A. Casnati, L. Marchiò, L. Baldini\*, S. Di Stefano\*, *Org. Biomol. Chem.*, **2021**, Advance Article, DOI: 10.1039/D1OB02096J.

Collaborazione con il Prof. G. Ercolani, Università di Roma Tor Vergata (Italia):

- 1) "Combinatorial Macrocyclizations under Thermodynamic Control: the Two-monomer Case" R. Cacciapaglia, S. Di Stefano\*, G. Ercolani\*, L. Mandolini\*, *Macromolecules*, **2009**, 42, 4077-4083.
- 2) "Catenation Equilibria between Ring Oligomers and their Relation to Effective Molarities. Models from Theories and Simulations" S. Di Stefano\*, G. Ercolani\*, *Macromolecular Theory and Simulations*, **2016**, 25, 63–73.

- 3) “*Equilibrium Effective Molarity as a Key Concept in Ring-Chain Equilibria, Dynamic Combinatorial Chemistry, Cooperativity, and Self-Assembly*” S. Di Stefano\*, G. Ercolani\*, *Advances in Physical Organic Chemistry*, **2016**, volume 50, 1-76.
- 4) “*Statistical Ring Catenation under Thermodynamic Control: Should the Jacobson–Stockmayer Cyclization Theory Take into Account Catenane Formation?*” S. Di Stefano\*, G. Ercolani\*, *J. Phys. Chem. B* **2017**, *121*, 649–656.
- 5) “*Time-programmable pH: Decarboxylation of Nitroacetic Acid Allows the Time-controlled Rising of pH to a Definite Value*” D. Del Giudice, E. Spatola, M. Valentini, C. Bombelli, G. Ercolani\*, S. Di Stefano\*, **2021**, *12*, 7460-7466.

Collaborazione con il gruppo del Proff. M. Lucarini ed E. Mezzina, Università di Bologna (Italia):

- 1) “*2-Cyano-2-phenylpropanoic Acid Triggers the Back and Forth Motions of an Acid–Base-Operated Paramagnetic Molecular Switch*”  
P. Franchi, C. Poderi, E. Mezzina, C. Biagini, S. Di Stefano\*, M. Lucarini\*, *J. Org. Chem.*, **2019**, *84*, 9364–9368.

Collaborazione con il gruppo del Prof. F. Ricci, Università di Roma Tor Vergata (Italia):

- 1) “*Dissipative operation of pH-responsive DNA-based nanodevices*”  
D. Mariottini, D. Del Giudice, G. Ercolani, S. Di Stefano\*, F. Ricci\*, *Chem. Sci.*, **2021**, *12*, 11735-11739.

**Parte XII– PARTECIPAZIONE delle attività di un gruppo di ricerca caratterizzato da collaborazioni INTERNAZIONALI e NAZIONALI.**

**XII A Partecipazione a livello internazionale**  
(il/i corresponding author/s è/sono asteriscato/i)

Collaborazione con il gruppo del Prof. J. de Mendoza, Universidad Autonoma de Madrid (Spain):

- 1) “*Towards an Artificial Acetylcholinesterase*” F. Cuevas, S. Di Stefano, O. J. Magrans, P. Prados, J. de Mendoza\*, L. Mandolini\*, *Chem. Eur.J.*, **2000**, 6, 3228-3234.  
*In questo caso la collaborazione è avvenuta nell’ambito del programma europeo COST D11 “Supramolecular Chemistry”*
- 2) “*Zwitterion Receptors*” in *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry* S. Di Stefano, L. Mandolini, P. Breccia, J. de Mendoza. J. R. Atwood & J. Steed editors, Marcel-Dekker Inc., New York, **2004**, 1639-1647. (non è indicato alcun corresponding author)

Collaborazione con il gruppo del Prof. U. Lüning, Institut für Organische Chemie der Christian-Albrechts-Universität di Kiel (Germany):

- 1) “*Concave Reagents 40. The Cu(II) Complex of a Concave Reagent as a Selective Supramolecular Catalyst For Ester Methanolysis*” R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, F. Fahrenkrug, U. Lüning\*, L. Mandolini\*, *J. Phys. Org. Chem.*, **2004**, 17, 350-355.  
*In questo caso la collaborazione è avvenuta nell’ambito del programma europeo COST D11 “Supramolecular Chemistry”*

Collaborazione con i gruppi del Prof. D. Reinhoudt, University of Twente Enschede (The Netherlands) e del Prof. Ungaro, Università di Parma (Italia):

- 1) “*Dinuclear Barium(II) Complexes Based on a Calix[4]arene Scaffold as Catalysts of Acyl Transfer*” R. Cacciapaglia, A. Casnati, S. Di Stefano, L. Mandolini\*, D. Paolemili, D. N. Reinhoudt\*, A. Sartori, and R. Ungaro\*, *Chemistry a European Journal*, **2004**, 10, 4336-4342.

Collaborazione con il gruppo della Professoressa L. Rodriguez, Departament de Química Inorganica, Universitat de Barcelona (Spain)

- 1) “*Unusual reversible complexation between atropisomeric naphthalenophanes and molecular oxygen*” L. Rodríguez\*, J. C. Lima, F. Pina, R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, A. Ruggi, *J. Phys. Chem. A*, **2011**, 115, 123-127

Collaborazione con il gruppo del Prof. D. A Leigh, School of Chemistry, University of Manchester (United Kingdom)

- 1) “*Dissipative Catalysis with a Molecular Machine*” C. Biagini, S. D. P. Fielden, D. A. Leigh\*, F. Schaufelberger, S. Di Stefano, D. Thomas, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, 58, 9876-9880.

XII B **Partecipazione a livello nazionale**  
(il/i corresponding author/s è/sono asteriscato/i)

Collaborazione con il gruppo del Prof. F. Ugozzoli, Università di Parma (Italia):

- 1) “*Metathesis Reactions of Formaldehyde Acetals – Experimental and Computational Investigation of Isomeric Families of Cyclophanes under Dynamic Conditions*” R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini\*, P. Mencarelli\*, F. Ugozzoli\*, *European Journal of Organic Chemistry*, **2008**, 186-195.

Collaborazione con il Prof. G. Ercolani, Università di Roma Tor Vergata (Italia):

- 1) “*Ring-Expanding Polymerization by Reversible Ring Fusion. A Fascinating Process Driven by Entropy*” G. Ercolani\*, S. Di Stefano, *Journal of Physical Chemistry B*, **2008**, 112, 4662-4665.

**Parte – XIII Conferenze su invito tenute in Università straniere e italiane (IC), Invited lectures tenute a Congressi (IL), Comunicazioni Orali tenute a Congressi (OP), Comunicazioni Flash tenute a Congressi (FP) e Organizzazione di Congressi.**

- 1 “*Scissione di Ammidi Attivate: Catalisi da complessi Mono e Bimetallici*” R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini. COFEM '97 Giornate di Chimica Organica Fisica e Meccanicistica 11-14 June 1997 Folgaria (TN). (OP)
- 2 “*Towards An Acetylcholinesterase Mimic*” F. Cuevas, S. Di Stefano, L. Mandolini, J. de Mendoza, P. Prados. 4° Congresso Nazionale di Chimica Supramolecolare 5-8 settembre 1999, Catania. (OP)
- 3 “*Catalizzatori Supramolecolari*” S. Di Stefano. 25° Corso Estivo di Sintesi Organica “A. Corbella”, 12-16 giugno 2000, Gargnano (Bs). (OP)
- 4 “*Towards An Artificial Acetylcholinesterase*” S. Di Stefano. European Research Conference on “Supramolecular Chemistry”, 31 August-5 settembre 2000, Urbino. (OP)
- 5 “*Catalizzatori Supramolecolari Fotomodulabili*” R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini. 3° SAYCS Sigma-Aldrich Young Chemists Symposium, Riccione, 19-21 maggio 2003. (OP)
- 6 “*Effective Molarities in Supramolecular Catalysis*” R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini. 6° Congresso Nazionale di Chimica Supramolecolare 7-10 settembre 2003, Urbino. (OP)
- 7 “*The Dynamic Covalent Chemistry of Macrocyclic Formals*” R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini, Working Group 0004-04 COST D31, 11-13 aprile 2005, Bonn. (OP)
- 8 “*Dynamic Covalent Chemistry of Macrocyclic Formals*” R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini, ESOR 10, 10<sup>th</sup> European Symposium on Organic Reactivity, 25-30 luglio 2005, Roma. (OP)
- 9 “*Meccanismo di Fusione e Fissione di Anello per la Reazione di Metatesi di Acetali Macro ciclici della Formaldeide (Una Classica Dicotomia  $S_N2/S_N1$ )*” R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini, COFEM 2006, Giornate di Chimica Organica Fisica e Meccanicistica, Catania, 21-23 settembre 2006. (OP)
- 10 “*Macrocyclization under Thermodynamic Control: Theory and Experiments*” R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, G. Ercolani, L. Mandolini, Working Group 0004-04 COST D31, 25-27 maggio 2008, Enschede (NE). (OP)
- 11 “*Macro ciclizzazioni sotto Controllo Termodinamico: Teoria ed Esperimenti*” R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, G. Ercolani, L. Mandolini, COFEM '08 Giornate di Chimica Organica Fisica e Meccanicistica 24-26 settembre 2008 Sestri Levante (La Spezia). (IL)
- 12 “*Theoretical and Experimental Features of Macrocyclization Equilibria*” S. Di Stefano, Seminario di Dipartimento, Istituto Ciamician, Alma Mater Università di Bologna, 26 gennaio 2011, Bologna. (IC)
- 13 “*A Very Fast Hydride Transfer at the Upper Rim of a Calix[4]arene. Proximity of 1,3 Distal Groups*” S. Di Stefano, L. Baldini, R. Cacciapaglia, A. Casnati, L. Mandolini, Calix 11, 11th International Conference on Calixarenes, 26-29 giugno 2011, Tarragona (Spain). (FP)
- 14 “*From Ring-Chain Equilibria to Dynamic Combinatorial Chemistry*” S. Di Stefano, 10° Congresso Nazionale di Chimica Supramolecolare 25-28 settembre 2011, Perugia. (IL)

- 15 “*Ring-Chain Equilibria and Dynamic Libraries*” S. Di Stefano, Department Lecture, Department of Chemical Engineering and Chemistry, Eindhoven University of Technology, Eindhoven (The Netherlands), 23 aprile 2013. (**IC**)
- 16 “*Effective Molarity (EM) and Critical Monomer Concentration (CC) in the Description of Dynamic Libraries of Cyclic Compounds*” S. Di Stefano, Department Lecture, Department of Chemistry, The University of Sheffield, Sheffield (England), 11 giugno 2014. (**IC**)
- 17 “*Theoretical Aspects of Ring-Chain Equilibria and Implications for Real Dynamic Libraries*” S. Di Stefano, Faculty Lecture, Department of Chemistry, The University of Girona, Girona (Spagna), 12 marzo 2015. (**IC**)
- 18 “*Aspetti Teorici della Chimica Dinamica Combinatoria ed Applicazioni Sperimentali: dal Riconoscimento ai Materiali Supramolecolari*” S. Di Stefano, Seminario di Istituto, IMC Istituto di Metodologie Chimiche, Montelibretti (Roma), 19 marzo 2015. (**IL**)
- 19 “*A Chemical Fuel for an Acid-Based Operated Molecular Switch*” J. A. Berrocal, C. Biagini, L. Mandolini, S. Di Stefano, XXXVII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Organica, Mestre 18-22 settembre 2016. (**OP**)
- 20 “*Controlling the Rate of Cyclic Motions of a Molecular Switch by a Fine Tuning of the Fuel Molecular Structure*” S. Di Stefano, C. Biagini, S. Albano, 13° Congresso Nazionale di Chimica Supramolecolare 18-21 giugno 2017, Santa Margherita di Pula (CA). (**OP**)
- 21 “*Chemical Fuels for Acid-base Operated Molecular Machines*” S. Di Stefano, Scientific Seminar, CLAN (Center for Light Activated Nanostructures) ISOF-CNR, Bologna 22 gennaio 2018. (**IC**)
- 22 “*Controlling the Motions of Acid-base Operated Molecular Machines*” S. Di Stefano, F. Di Pietri, S. Albano, L. Mandolini, O. Lanzalunga, C. Biagini, XXXVIII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Organica, Milano 09-13 settembre 2018. (**OP**)
- 23 “*How to make Autonomous the Motions of a Chemically Fuelled Molecular Machine*”, C. Biagini, G. Capocasa, V. Cataldi, D. Del Giudice, L. Mandolini, S. Di Stefano, XXXIX Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Organica, Torino 08-12 settembre 2019. (**OP**)
- 24 “*Exploring Different Features of Supramolecular Chemistry*”, S. Di Stefano, Cerimonia di Conferimento Premi e Medaglie della Divisione di Chimica Organica 2020, Roma, 25 giugno 2021. (**IL**)

Organizzatore come **Chairperson** della prima edizione del congresso “CHIMICA SUPRAMOLECOLARE: GIORNATA DEI DOTTORANDI” tenutosi al CNR (Sede Centrale Nazionale Piazzale Aldo Moro, 7) il 24 e 25 maggio 2018. Durante il congresso si sono tenute 41 presentazioni tra Invited Lectures, Presentazioni Orali e Presentazioni Flash. Il congresso è stato tenuto sotto l’egida del gruppo italiano di Chimica Supramolecolare e della Società Chimica Italiana.

Inoltre i risultati del mio lavoro di ricerca sono stati presentati da me o dai miei collaboratori attraverso comunicazioni poster e dai miei collaboratori come presentazioni orali in ulteriori circa 100 comunicazioni tenute in congressi nazionali ed internazionali dal 1997 al 2021.



#### **Parte – XIV Altre Informazioni**

Ho frequentato le seguenti scuole di Chimica nazionali ed internazionali:

- 1) Corso Nazionale di Introduzione alla Fotochimica, 14-17 settembre 1998, Bologna.
- 2) Postgraduate Winter School on Organic Reactivity - Wisor VIII, 8-16 gennaio 1999, Bressanone (Bz).
- 3) 25° Corso Estivo di Sintesi Organica "A. Corbella", 12-16 giugno 2000, Gargnano (Bs).

Ho completato il servizio militare come ausiliario volontario nel Corpo Nazionale dei Vigili del Fuoco (01/09/1997-31/08/1998). Ho effettuato il servizio all' Ispettorato per l' Organizzazione Centrale e Periferica dei VV FF, Ministero dell' Interno.

**Parte – XV Lista Completa delle Pubblicazioni.** L' Impact Factor (IF) è relativo all'anno di pubblicazione (per le pubblicazioni più recenti, se non ancora disponibile, è stato utilizzato l'IF dell'anno immediatamente precedente a quello di pubblicazione). Nelle pubblicazioni in cui sono corresponding author (o co-corresponding author) il mio nome è asteriscato.

- 1) "Catalysis of Anilide Ethanolysis by Barium- and Strontium-Ethoxide Pairs and Their Complexes with 18-Crown-6"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, E. Kelderman, L. Mandolini, F. Spadola, *J. Org. Chem.*, **1998**, *63*, 6476-6479. (IF 3.50)
- 2) "Supramolecular Catalysis of Ester and Amide Cleavage by a Dinuclear Barium(II) Complex"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, E. Kelderman, L. Mandolini, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **1999**, *38*, 348-351. (IF 8.00)
- 3) "Towards an Artificial Acetylcholinesterase"  
F. Cuevas, S. Di Stefano, O. J. Magrans, P. Prados, J. de Mendoza, L. Mandolini, *Chem. Eur. J.*, **2000**, *6*, 3228-3234. (IF 4.70)
- 4) "A Dinuclear Strontium(II) Complex as Substrate Selective Catalyst of Ester Cleavage"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini, *J. Org. Chem.*, **2001**, *66*, 5926-5928. (IF 3.28)
- 5) "Size Selective Catalysis of Ester and Anilide Cleavage by the Dinuclear Barium (II) Complexes of *Cis*- and *Trans*-Stilbeno-bis-18-Crown-6"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini, *J. Org. Chem.*, **2002**, *67*, 521-525. (IF 3.22)
- 6) "6-exo-Hydroxybicyclo[2.2.2]octan-2-ones from the Corresponding Acetates by Methanolysis in the Presence of CH<sub>3</sub>ONa / La(OTf)<sub>3</sub>"  
S. Di Stefano, F. Leonelli, B. Garofalo, L. Mandolini, R. Marini Bettolo, L. M. Migneco, *Org. Lett.*, **2002**, *4*, 2783-2785. (IF 3.72)
- 7) "The Bis-Barium Complex of a Butterfly Crown Ether as a Phototunable Supramolecular Catalyst"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini, *J. Am. Chem. Soc.*, **2003**, *125*, 2224-2227. (IF 6.52)
- 8) "Effective Molarities in Supramolecular Catalysis of Two Substrate Reactions"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini, *Acc. Chem. Res.*, **2004**, *37*, 1131-1132. (IF 13.15)
- 9) "Concave Reagents 40<sup>#</sup>. The Cu(II) Complex of a Concave Reagent as a Selective Supramolecular Catalyst For Ester Methanolysis"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, F. Fahrenkrug, U. Lüning, L. Mandolini, *J. Phys. Org. Chem.*, **2004**, *17*, 350-355. (IF 1.21)
- 10) "Zwitterion Receptors" in Encyclopedia of Supramolecular Chemistry  
S. Di Stefano, L. Mandolini, P. Breccia, J. de Mendoza.  
J. R. Atwood & J. Steed editors, Marcel-Dekker Inc., New York, **2004**, 1639-1647 (Questa pubblicazione non è indicizzata né in Scopus né in Web of Science).
- 11) "Dinuclear Barium(II) Complexes Based on a Calix[4]arene Scaffold as Catalysts of Acyl Transfer"  
R. Cacciapaglia, A. Casnati, S. Di Stefano, L. Mandolini, D. Paolemili, D. N. Reinhoudt, A. Sartori, and R. Ungaro, *Chem. Eur. J.*, **2004**, *10*, 4336-4342. (IF 4.52)
- 12) "Metathesis Reaction of Formaldehyde Acetals: An Easy Entry into the Dynamic Covalent Chemistry of Cyclophane Formation"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini, *J. Am. Chem. Soc.*, **2005**, *127*, 13666-13671. (IF 7.42)

- 13) "Ring Fusion / Ring Fission Mechanism for the Metathesis Reaction of Macrocyclic Formaldehyde Acetals"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini, *Chem. Eur. J.*, **2006**, *12*, 8566-8570. (IF 5.02)
- 14) "Metathesis Reactions of Formaldehyde Acetals – Experimental and Computational Investigation of Isomeric Families of Cyclophanes under Dynamic Conditions"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini, P. Mencarelli, F. Ugozzoli, *Eur. J. Org. Chem.*, **2008**, 186-195. (IF 3.02)
- 15) "Catalysis of Acyl Transfer Processes by Crown-Ether Supported Alkaline-Earth Metal Ions"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini, in *Supramolecular Catalysis*, Piet W. N. M. van Leeuwen (Ed.), WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, **2008**.
- 16) "Ring-Expanding Polymerization by Reversible Ring Fusion. A Fascinating Process Driven by Entropy"  
G. Ercolani, S. Di Stefano, *J. Phys. Chem. B*, **2008**, *112*, 4662-4665. (IF 4.19)
- 17) "On the 'livingness' of a dynamic library of cyclophane formaldehyde acetals incorporating calix[4]arene subunits"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano\*, L. Mandolini, *J. Phys. Org. Chem.*, **2008**, *21*, 688-693. (IF 1.42)
- 18) "Combinatorial Macrocyclizations under Thermodynamic Control: the Two-monomer Case"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano\*, G. Ercolani\*, L. Mandolini\*, *Macromolecules*, **2009**, *42*, 4077-4083. (IF 4.54)
- 19) "Reactivity Control by Calixarenes"  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini, in *Molecular Encapsulation: Organic Reactions in Constrained Systems*, Udo Brinker J-L Miesusset (Eds.), WILEY and Sons Ltd, Chichester, West-Sussex (UK), **2010**, 201-224.)
- 20) "Electron transfer from wheel to axle in a rotaxane. A mass spectrometric investigation"  
S. Pasquale, S. Di Stefano\*, B. Masci\*, *New J. Chem.*, **2010**, *34*, 426-431. (IF 2.63)
- 21) "Theoretical Features of Macrocyclization Equilibria and Their Application on Transacetalation Based Dynamic Libraries"  
S. Di Stefano\*, *J. Phys. Org. Chem.*, **2010**, *23*, 797-805. (IF 1.48)
- 22) "Photoinversion of Sulfoxides as a Source of Diversity in Dynamic Combinatorial Chemistry"  
S. Di Stefano\*, M. Mazzonna, E. Bodo, L. Mandolini, O. Lanzalunga\*, *Org. Lett.*, **2011**, *13*, 142-145. (IF 5.86)
- 23) "Unusual reversible complexation between atropisomeric naphthalenophanes and molecular oxygen"  
L. Rodríguez, J. C. Lima, F. Pina, R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, A. Ruggi, *J. Phys. Chem. A*, **2011**, *115*, 123-127. (IF 2.95)
- 24) "A Well-Behaved Dynamic Library of Cyclophane Formaldehyde Acetals Incorporating Diphenylmethane Units"  
J. A. Berrocal, R. Cacciapaglia, S. Di Stefano\*, *Org. Biomol. Chem.*, **2011**, *9*, 8190-8194. (IF 3.70)
- 25) "Target-Induced Amplification in a Dynamic Library of Macrocycles. A Quantitative Study"  
J. A. Berrocal, R. Cacciapaglia, S. Di Stefano\*, Luigi Mandolini, *New J. Chem.*, **2012**, *36*, 40-43. (IF 2.97)
- 26) "A Photodynamic Library of Tetrasulfinylcalix[4]arenes: the Sulfinyl Dance"  
R. Cacciapaglia\*, S. Di Stefano\*, O. Lanzalunga, L. Maugeri, M. Mazzonna, *Eur. J. Org. Chem.*, **2012**, 1426-1430. (IF 3.34)

- 27) “A Highly Efficient Intramolecular Cannizzaro Reaction between 1,3-Distal Formyl Groups at the Upper Rim of a *cone*-Calix[4]arene”  
M. Galli, J. A. Berrocal, S. Di Stefano\*, R. Cacciapaglia, L. Mandolini, L. Baldini, A. Casnati, F. Ugozzoli, *Org. Biomol. Chem.*, **2012**, *10*, 5109-5012. (IF 3.57)
- 28) “Naphthalenophane Formaldehyde Acetals as Candidate Structures for the Generation of Dynamic Libraries via Transacetalation Processes”  
A. Ruggi, R. Cacciapaglia\*, S. Di Stefano\*, E. Bodo, F. Ugozzoli, *Tetrahedron*, **2013**, *69*, 2767-2774. (IF 2.82)
- 29) “Fast Transimination in Organic Solvents in the Absence of Proton and Metal Catalysts. A Key to Imine Metathesis Catalyzed by Primary Amines under Mild Conditions”  
M. Ciaccia, R. Cacciapaglia, P. Mencarelli, L. Mandolini, S. Di Stefano\*, *Chem. Sci.*, **2013**, *4*, 2253–2261. (IF 8.60)
- 30) “One-Shot Preparation of an Inherently Chiral Trifunctional Calix[4]arene from an Easily Available Cone-Triformylcalix[4]arene”  
M. Ciaccia, I. Tosi, R. Cacciapaglia, A. Casnati, L. Baldini\*, S. Di Stefano\*, *Org. Biomol. Chem.*, **2013**, *11*, 3642-2648. (IF 3.49)
- 31) “Reactivity of Carbonyl and Phosphoryl Groups at Calixarenes”  
R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, L. Mandolini, R. Salvio, *Supramolecular Chemistry*, **2013**, *25*, 537-554. (IF 2.13)
- 32) “Substituent Effect on the Catalytic Activity of Bipyrrolidine Based Iron Complexes”  
G. Olivo, O. Lanzalunga, L. Mandolini, S. Di Stefano\*, *J. Org. Chem.*, **2013**, *78*, 11508–11512. (IF 4.64)
- 33) “Effective Catalysis of Imine Metathesis by means of Fast Transiminations between Aromatic-Aromatic or Aromatic-Aliphatic Amines”  
M. Ciaccia, Silvia Pilati, R. Cacciapaglia, L. Mandolini, S. Di Stefano\*, *Org. Biomol. Chem.*, **2014**, *12*, 3282-3287. (IF 3.56)
- 34) “Hydrocarbon Oxidation Catalyzed by a Cheap Nonheme Imine-based Iron(II) Complex”  
G. Olivo, G. Arancio, L. Mandolini, O. Lanzalunga, S. Di Stefano\*, *Cat. Sci. & Technol.*, **2014**, *4*, 2900-2903. (IF 5.43)
- 35) “Copper(I)-Induced Amplification of a [2]catenane in a Virtual Dynamic Library of Macrocyclic Alkenes”  
J. A. Berrocal, M. M. L. Nieuwenhuizen, L. Mandolini, E. W. Meijer\*, S. Di Stefano\*, *Org. Biomol. Chem.*, **2014**, *12*, 6167 - 6174. (IF 3.56)
- 36) “Supramolecular Control of Reactivity and Catalysis. Effective Molarities of Recognition-Mediated Bimolecular Reactions”  
S. Di Stefano\*, R. Cacciapaglia, L. Mandolini\*, *Eur. J. Org. Chem.*, **2014**, 7304-7315. (IF 3.07)
- 37) “Applications of Dynamic Combinatorial Chemistry for the Determination of Effective Molarity”  
M. Ciaccia, I. Tosi, L. Baldini, R. Cacciapaglia, L. Mandolini, S. Di Stefano\*, C. A. Hunter\*, *Chem. Sci.*, **2015**, *6*, 144–151. (IF 9.14)
- 38) “Mechanisms of Imine Exchange Reactions in Organic Solvents”  
M. Ciaccia, S. Di Stefano\*, *Org. Biomol. Chem.*, **2015**, *13*, 646–654. (IF 3.56)

- 39) "Isotope Effect Profiles in the *N*-demethylation of *N,N*-dimethylanilines. A Key to Determine the  $pK_a$  of Nonheme Fe(III)-OH Complexes"  
A. Barbieri, M. De Gennaro, S. Di Stefano, O. Lanzalunga, A. Lapi, M. Mazzonna, G. Olivo, B. Ticconi, *Chem. Commun.*, **2015**, *51*, 5032-5035. (IF 6.57)
- 40) "Ring-opening Metathesis Polymerization of a Diolefinic [2]-Catenane-copper(I) Complex: An Easy Route to Polycatenanes"  
J. A. Berrocal, L. M. Pitet, M. M. L. Nieuwenhuizen, L. Mandolini, E. W. Meijer\*, S. Di Stefano\*, *Macromolecules*, **2015**, *48*, 1358-1363. (IF 5.55)
- 41) "A CuI-Based Metallo-Supramolecular Gellike Material Built from a Library of Oligomeric Ligands Featuring Exotopic 1,10-Phenanthroline Units"  
J. A. Berrocal, S. Albano, L. Mandolini, S. Di Stefano\*, *Eur. J. Org. Chem.*, **2015**, 7504–7510. (IF 3.07)
- 42) "C-H Bond Oxidation Catalyzed by an Imine Based Iron Complex: A Mechanistic Insight"  
G. Olivo, M. Nardi, D. Vidal-Sanchez, A. Barbieri, A. Lapi, L. Gómez, O. Lanzalunga, M. Costas\*, S. Di Stefano\*, *Inorg. Chem.*, **2015**, *54*, 10141–10152. (IF 4.82)
- 43) "Catenation Equilibria between Ring Oligomers and their Relation to Effective Molarities. Models from Theories and Simulations"  
S. Di Stefano\*, G. Ercolani\*, *Macromolecular Theory and Simulations*, **2016**, *25*, 63–73. (IF 1.72)
- 44) "Nonheme Imine-based Iron Complexes as Catalysts for Oxidative Processes"  
G. Olivo, O. Lanzalunga, S. Di Stefano\*, *Adv. Synth. & Cat.*, **2016**, *358*, 843-863. (IF 5.65)
- 45) "Oxidation of Aryl Diphenylmethyl Sulfides Promoted by a Non-Heme Iron(IV)-Oxo Complex: Evidence for Electron Transfer-Oxygen Transfer Mechanism"  
A. Barbieri, R. De Carlo Chimienti, T. Del Giacco, S. Di Stefano, O. Lanzalunga, A. Lapi, M. Mazzonna, G. Olivo, M. Salamone, *J. Org. Chem.*, **2016**, *81*, 2513–2520. (IF 4.85)
- 46) "Coupling Decarboxylation of 2-Cyano-2-phenylpropanoic Acid to Large Amplitude Motions: a Convenient Fuel for an Acid-Base Operated Molecular Switch"  
J. A. Berrocal, C. Biagini, L. Mandolini, S. Di Stefano\*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 6997–7001. (IF 11.99)
- 47) "Equilibrium Effective Molarity as a Key Concept in Ring-Chain Equilibria, Dynamic Combinatorial Chemistry, Cooperativity, and Self-Assembly"  
S. Di Stefano\*, G. Ercolani\*, *Adv. Phys. Org. Chem.*, **2016**, volume 50, 1-76. (IF 0.75).
- 48) "Alcohol Oxidation with H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> Catalyzed by a Cheap and Promptly Available Imine Based Iron Complex"  
G. Olivo, S. Giosia, A. Barbieri, O. Lanzalunga, S. Di Stefano\*, *Org. Biomol. Chem.*, **2016**, *14*, 10630-10635. (IF 3.56)
- 49) "Electron Transfer Mechanism in the Oxidation of Aryl 1-Methyl-1-phenylethyl Sulfides Promoted by Nonheme Iron(IV)- Oxo Complexes: The Rate of the Oxygen Rebound Process"  
A. Barbieri, T. Del Giacco, S. Di Stefano, O. Lanzalunga, A. Lapi, M. Mazzonna, G. Olivo, *J. Org. Chem.*, **2016**, *81*, 12382–12387. (IF 4.85)
- 50) "Role of Electron Transfer Processes in the Oxidation of Aryl Sulfides Catalysed by Nonheme Iron Complexes"  
A. Barbieri, S. Di Stefano, O. Lanzalunga, A. Lapi, M. Mazzonna, G. Olivo, *Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements*, **2017**, *112*, 241-244. (IF 0.67)

- 51) “Statistical Ring Catenation under Thermodynamic Control: Should the Jacobson–Stockmayer Cyclization Theory Take into Account Catenane Formation?”  
S. Di Stefano\*, G. Ercolani\*, *J. Phys. Chem. B*, **2017**, *112*, 649–656. (IF 3.15)
- 52) “Influence of Topology on the Gelation Behavior of Coordination Polymers prepared via ROMP of Macrocyclic Olefins”  
S. Albano, A. Fantozzi, J. A. Berrocal, S. Di Stefano\*, *J. Poly. Sci., Part A: Polymer Chemistry*, **2017**, *55*, 1237–1242. (IF 2.59)
- 53) “Formation of Imidazo[1,5-a]pyridine Derivatives Due to the Action of Fe<sup>2+</sup> on Dynamic Libraries of Imines”  
S. Albano, G. Olivo, L. Mandolini, C. Massera, F. Ugozzoli, S. Di Stefano\*, *J. Org. Chem.*, **2017**, *82*, 3820–3825. (IF 4.81)
- 54) “Following a Chemical Reaction in the ms Timescale by Simultaneous X-Ray and UV/Vis Spectroscopy”  
G. Olivo, A. Barbieri, V. Dantignana, F. Sessa, V. Migliorati, M. Monte, S. Pascarelli, T. Narayanan, O. Lanzalunga\*, S. Di Stefano\*, P. D’Angelo\*, *J. Phys. Chem. Lett.*, **2017**, *8*, 2958–2963. (IF 8.71)
- 55) “Supramolecular Recognition Allows Remote, Site-selective C-H Oxidation of Methylenic Sites in Linear Amines”  
G. Olivo\*, G. Farinelli, A. Barbieri, O. Lanzalunga, S. Di Stefano\*, M. Costas\*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, *56*, 16347–16351. (IF = 12.10)
- 56) “Direct Hydroxylation of Benzene and Aromatics with H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> Catalyzed by a Self-Assembled Iron Complex: Evidence for a Metal-based Mechanism”  
G. Capocasa, G. Olivo, A. Barbieri, O. Lanzalunga, S. Di Stefano\*, *Cat. Sci. & Technol.*, **2017**, *7*, 5677–5686. (IF 5.37) (**Hot Article**).
- 57) “Variations in the Fuel Structure Control the Rate of the Back and Forth Motions of a Chemically Fuelled Molecular Switch”  
C. Biagini, S. Albano, R. Caruso, L. Mandolini, J. A. Berrocal, S. Di Stefano\*, *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 181–188. (IF = 9.56) (**Editor’s Choice Collection**)
- 58) “Photoinduced Release of a Chemical Fuel for Acid-Base Operated Molecular Machines”  
C. Biagini, F. Di Pietri, L. Mandolini, O. Lanzalunga, S. Di Stefano\*, *Chem. Eur. J.*, **2018**, *24*, 10122–10127. (IF = 5.16) (**Hot Paper**, Spotlighted in *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2018**, *57*, 10006–10009)
- 59) “Oxidative Functionalization of Aliphatic and Aromatic Amino Acid Derivatives with H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> Catalyzed by a Nonheme Imine Based Iron Complex”  
B. Ticconi, A. Colcerasa, S. Di Stefano, O. Lanzalunga, A. Lapi, M. Mazzonna G. Olivo, *RSC Advances*, **2018**, *8*, 19144–19151. (IF = 3.05)
- 60) “Inherently Chiral Cone-calix[4]arenes via a Subsequent Upper Rim Ring-closing/opening Methodology”  
J. A. Berrocal, M. B. Baker, L. Baldini, A. Casnati, S. Di Stefano, *Org. Biomol. Chem.*, **2018**, *16*, 7255–7264. (IF = 3.49)
- 61) “The Canonical Behavior of the Entropic Component of Thermodynamic Effective Molarity. An Attempt at Unifying Covalent and Noncovalent Cyclizations”  
S. Di Stefano\*, L. Mandolini\*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2019**, *21*, 955–987. (IF = 3.43) (**Hot Article**).
- 62) “Enzyme-like Substrate-Selectivity in C-H Oxidation Enabled by Recognition”  
G. Olivo\*, G. Capocasa, O. Lanzalunga, S. Di Stefano\*, M. Costas\*, *Chem. Commun.*, **2019**, *55*, 917–920. (IF = 5.996)

- 63) “Coupled X-Ray Absorption/ UV-Vis Monitoring of Fast Oxidation Reactions Involving a Non-Heme Iron Oxo Complex”  
G. Capocasa, F. Sessa, F. Tavani, G. Olivo, M. Monte, S. Pascarelli, O. Lanzalunga\*, S. Di Stefano\*, P. D'Angelo\*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, *141*, 2299–2304. (IF = 14.61)
- 64) “Imine-based Iron and Manganese Complexes as Catalysts for Alkane Functionalization”  
G. Olivo, O. Lanzalunga, S. Di Stefano, in *Alkane Functionalization*, Armando J. L Pombeiro, Maria de Fátima Costa Guedes da Silva (Eds.), John Wiley & Sons, Ltd., Hoboken (NJ), **2019**.
- 65) “Dissipative Catalysis with a Molecular Machine”  
C. Biagini, S. D. P. Fielden, D. A. Leigh, F. Schaufelberger, S. Di Stefano, D. Thomas, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, *58*, 9876–9880. (IF = 12.96) (**Hot Paper, First Cover Angew. Chem. Int. Ed., Top Downloaded 2018-2019**)
- 66) “2-Cyano-2-phenylpropanoic Acid Triggers the Back and Forth Motions of an Acid–Base-Operated Paramagnetic Molecular Switch”  
P. Franchi, C. Poderi, E. Mezzina, C. Biagini, S. Di Stefano\*, M. Lucarini\*, *J. Org. Chem.*, **2019**, *84*, 9364–9368. (IF = 4.34)
- 67) “N-Hydroxyphthalimide: A Hydrogen Atom Transfer Mediator in Hydrocarbon Oxidations Promoted by Nonheme Iron(IV)–Oxo Complexes”  
A. Barbieri, O. Lanzalunga, A. Lapi. S. Di Stefano, *J. Org. Chem.*, **2019**, *84*, 13549–13556. (IF = 4.34)
- 68) “The Hydrolysis of the Anhydride of 2-Cyano-2-phenylpropanoic Acid Triggers the Repeated Back and Forth Motions of an Acid- Base Operated Molecular Switch”  
C. Biagini, G. Capocasa, V. Cataldi, D. Del Giudice, L. Mandolini, S. Di Stefano\*, *Chem. Eur. J.*, **2019**, *25*, 15205 – 15211. (IF = 4.86)
- 69) “Abiotic Chemical Fuels for the Operation of Molecular Machines”  
C. Biagini, S. Di Stefano\*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, *59*, 8344 –8354. (IF = 15.34)
- 70) “Supramolecular Catalysts Featuring Crown Ethers as Recognition Units”  
S. Di Stefano\*, G. Capocasa, L. Mandolini\*, *Eur. J. Org. Chem.*, **2020**, 3340–3350. (IF = 3.02) (**Very Important Paper, VIP**)
- 71) “Controlling the Liberation Rate of the In Situ Release of a Chemical Fuel for the Operationally Autonomous Motions of Molecular Machines”  
C. Biagini, G. Capocasa, D. Del Giudice, V. Cataldi, L. Mandolini, S. Di Stefano\*, *Org. Biomol. Chem.*, **2020**, *18*, 3867–3873. (IF = 3.88) (**Hot Article Collection**)
- 72) “Predictable Selectivity in Remote C-H Oxidation of Steroids: Analysis of Substrate Binding Mode”  
G. Olivo\*, G. Capocasa, B. Ticconi, O. Lanzalunga, S. Di Stefano\*, M. Costas\*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, *59*, 12703–12708. (IF = 15.34) (**Very Important Paper, VIP**)
- 73) “Easy Synthesis of a Self-Assembled Imine-based Iron(II) Complex Endowed with Crown-ether Receptors”  
G. Capocasa, M. Di Berto Mancini, F. Fratello, O. Lanzalunga, G. Olivo, S. Di Stefano\*, *Eur. J. Org. Chem.*, **2020**, 3390–3397. (IF = 3.02)
- 74) “Direct Mechanistic Evidence for a Non-heme Complex Reaction Through a Multivariate XAS Analysis”  
F. Tavani, A. Martini, G. Capocasa, S. Di Stefano, O. Lanzalunga, P. D'Angelo, *Inorg. Chem.*, **2020**, *59*, 14, 9979–9989. (IF = 5.17)

- 75) “Time Programmable Locking/Unlocking of the Calix[4]arene Scaffold by Means of Chemical Fuels”  
D. Del Giudice, E. Spatola, R. Cacciapaglia, A. Casnati, L. Baldini\*, G. Ercolani\*, S. Di Stefano\*, *Chem. Eur. J.*, **2020**, *26*, 14954 – 14962. (IF = 5.24)
- 76) “Insight into the Chemoselective Aromatic vs Side-chain Hydroxylation of Alkylaromatics with H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> Catalyzed by a Non-Heme Imine Based Iron Complex”  
B. Ticconi, G. Capocasa, A. Cerrato, S. Di Stefano, A. Lapi, B. Marincioni, G. Olivo, *Cat. Sci. & Technol.*, **2021**, *11*, 171-178. (IF = 6.12)
- 77) “Direct Structural and Mechanistic Insights into Fast Biomolecular Chemical Reactions in Solutions Through a Coupled XAS/UV Multivariate Statistical Analysis”  
F. Tavani, G. Capocasa, A. Martini, F. Sessa, S. Di Stefano, O. Lanzalunga, P. D'Angelo, *Dalton Trans.*, **2021**, *50*, 131–142. (IF = 4.39)
- 78) “Activation of C-H Bonds by a Nonheme iron(IV)-oxo Complex: Mechanistic Evidence Through a Coupled EDXAS/UV-Vis Multivariate Analysis”  
F. Tavani, G. Capocasa, A. Martini, F. Sessa, S. Di Stefano, O. Lanzalunga, P. D'Angelo, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2021**, *23*, 1188-1196. (IF = 3.68)
- 79) “Increasing the Steric Hindrance Around the Catalytic Core of a Self-Assembled Imine-Based Non-Heme Iron Catalyst for C-H Oxidation”  
F. Fratello, G. Capocasa, G. Olivo, K. Abdel Hady, C. Sappino, M. Di Berto Mancini, S. Levi Mortera, O. Lanzalunga, S. Di Stefano\*, *RSC Advances*, **2021**, *11*, 537–542. (IF = 3.36)
- 80) “Insights into the Structure of Reaction Intermediates Through Coupled X-ray Absorption/UV-Vis Spectroscopy”  
F. Tavani, A. Martini, F. Sessa, G. Capocasa, G. Olivo, O. Lanzalunga, S. Di Stefano, P. D'Angelo, *Synchrotron Radiation Science and Applications In: Di Cicco A., Giuli G., Trapananti A. (eds) Synchrotron Radiation Science and Applications. Springer Proceedings in Physics, vol 220 (p 141-154).* **2021**. Springer, Cham.
- 81) “Time-programmable pH: Decarboxylation of Nitroacetic Acid Allows the Time-controlled Rising of pH to a Definite Value”  
D. Del Giudice, E. Spatola, M. Valentini, C. Bombelli, G. Ercolani\*, S. Di Stefano\*, *Chem. Sci.*, **2021**, *12*, 7460–7466. (IF = 9.83)
- 82) “New Horizons for Catalysis Disclosed by Supramolecular Chemistry”  
G. Olivo\*, G. Capocasa, D. Del Giudice, O. Lanzalunga, S Di Stefano\*, *Chem. Soc. Rev.*, **2021**, *50*, 7681–7724. (IF = 54.56)
- 83) “Change of Selectivity in C-H Functionalization Promoted by Nonheme Iron(IV)-oxo Complexes by Effect of N-hydroxyphthalimide HAT Mediator”  
M. Di Berto Mancini, A. Del Gelsomino, S. Di Stefano, F. Fratello, A. Lapi, O. Lanzalunga, G. Olivo, S. Sajeva, *ACS Omega*, **2021**, *6*, 40, 26428–26438. (IF = 3.51)
- 84) “Dissipative Operation of pH-responsive DNA-based Nanodevices”  
D. Mariottini, D. Del Giudice, G. Ercolani, S. Di Stefano\*, F. Ricci\*, *Chem. Sci.*, **2021**, *12*, 11735-11739. (IF = 9.83)



- 85) “Dissipative Control of the Fluorescence of a 1,3-Dipyrenyl Calix[4]arene in the Cone Conformation”  
E. Spatola, F. Rispoli, D. Del Giudice, R. Cacciapaglia, A. Casnati, L. Marchiò, L. Baldini\*, S. Di Stefano\*,  
*Org. Biomol. Chem.*, **2022**, *20*, 132–138 (IF = 3.88) (**Hot Article Collection**)
- 86) “Two faces of the same coin: coupling X-ray Absorption and NMR spectroscopies to investigate the exchange reaction between prototypical Cu coordination complexes”  
D. Del Giudice, F. Tavani, M. Di Berto Mancini, F. Fratello, M. Busato, D. Oliveira De Souza, F. Cenesi, O. Lanzalunga\*, S. Di Stefano\*, P. D’Angelo\*, *Chem. Eur. J.*, **2022**, *28*, e2021038. (IF = 5.24)
- 87) “Temporal Control of the Host-Guest Properties of a Calix[6]arene Receptor by Use of a Chemical Fuel”  
F. Rispoli, E. Spatola, D. Del Giudice, R. Cacciapaglia, A. Casnati, L. Baldini\*, S. Di Stefano\*, *J. Org. Chem.* **2022**, *87*, 3623-3629. (IF = 4.35) (In the list of JOC **Most Read Articles** on 14 March 2022)
- 88) “Dissipative Dynamic Covalent Chemistry (DDCvC) Based on the Transimination Reaction”  
D. Del Giudice, M. Valentini, G. Melchiorre, E. Spatola, S. Di Stefano\*, *Chem. Eur. J.*, **2022**, *28*, e202200685. (IF = 5.24)

ROMA 22 / 03 / 2022

Stefano Di Stefano