

# Fabio Ramondo - Curriculum Vitae

## Dati Personali

Nato a Roma il 19 Settembre 1962 .

Università degli Studi di Roma La Sapienza  
Dipartimento di Chimica  
Piazzale A. Moro 5  
I-00185 Roma

Phone: (0039) 06-49913740

Fax:

E-mail: fabio.ramondo@uniroma1.it

## Istruzione universitaria

Laurea in Chimica, luglio 1987, Università di Roma La Sapienza. Voto: 110-110 e lode. Titolo: Spettri FT-IR in matrice di alogenuri di calcio.

Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche (IV ciclo), 1992, Università di Roma La Sapienza. Titolo: Studio di strutture molecolari in fase vapore.

## Esperienza professionale

Borsa di studio CNR (1988) presso il Centro Termodinamica Chimica delle Alte Temperature.

Ricercatore universitario in Chimica Fisica da Novembre 1994 a Ottobre 2002 presso la Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali dell'Università dell'Aquila.

Professore Associato in Chimica Fisica da Ottobre 2002 a settembre 2019 presso il Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche dell'Università dell'Aquila.

Professore Associato in Chimica Fisica da settembre 2019 ad oggi presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma La Sapienza.

## Attività di ricerca

L'attività di ricerca del Prof. Fabio Ramondo ha come tema generale lo studio della struttura e delle proprietà chimico fisiche di specie molecolari in fase vapore e in fase condensata. Le diverse ricerche si sono sviluppate nel corso degli anni secondo i seguenti indirizzi

1. Studio della struttura di specie molecolari in fase vapore prodotte da vaporizzazione di liquidi e solidi. Questa tematica ha interessato diversi composti organici e inorganici e ha avuto inizio subito dopo il lavoro di tesi. Sono stati studiati diversi sistemi con un approccio teorico-sperimentale che ha consentito di assegnare e interpretare spettri infrarossi delle molecole in fase vapore con metodi quantomeccanici ab initio.

2. Studio della struttura di molecole in fase gassosa mediante diffrazione di elettroni

Sono state determinate con grande accuratezza le geometrie di una classe di molecole, i derivati mono

e polisostituiti del benzene, dallo studio dello spettro di diffrazione di elettroni. La presenza di un sostituente sull'anello benzenico produce sensibili deformazioni dalla geometria  $D_{6h}$  dell'anello che possono essere determinate con grande accuratezza mediante diffrazione di elettroni. Esiste una correlazione tra entità della deformazione e natura elettronica del sostituente e diversi lavori sono stati pubblicati nei quali questi aspetti sono stati ampiamente discussi. Per la maggior parte di questi studi si è ricorso anche a tecniche quantomeccaniche ab initio che hanno evidenziato chiare correlazioni tra geometria e proprietà elettroniche in accordo con il risultato sperimentale. Successivamente lo studio della trasmissione degli effetti elettronici di un sostituente è stato esteso prendendo in considerazione una varietà di frameworks idrocarburici e analizzando le variazioni strutturali che si osservano su un anello benzenico legato al termine del framework al variare della natura del sostituente. In molti casi è possibile separare gli effetti elettronici induttivi da quelli mesomerici sulla base delle deformazioni geometriche osservate sull'anello benzenico.

3. Studio delle variazioni di parametri molecolari prodotte da interazioni di legame idrogeno.

Un'altra tematica oggetto di alcuni lavori ha riguardato l'effetto che le interazioni intermolecolari, in particolare il legame idrogeno, producono sulla struttura elettronica, sulla geometria e sulla reattività delle molecole. Per evidenziare questi effetti si è ricorsi al confronto tra geometrie sperimentali della stessa molecola determinate in fasi di aggregazione diverse. Quando gli effetti sono molto piccoli si sono condotti studi teorici sugli stessi sistemi modellando opportunamente la fase condensata con metodi quantomeccanici.

4. Studio della struttura e delle proprietà di liquidi e di soluzioni mediante diffrazione di raggi X e simulazioni di dinamica molecolare.

Lo studio delle interazioni intermolecolari è stato infine sviluppato negli ultimi anni ponendo una particolare attenzione ai sali liquidi a temperatura ambiente (liquidi ionici). In tale campo la sinergia tra metodi di calcolo e metodi sperimentali è fondamentale per determinarne la struttura. La ricerca è stata condotta sia su liquidi ionici puri che sulle loro miscele ed ha coinvolto tecniche di diffrazione di raggi X in dispersione di energia (EDXD) e di spettroscopia (IR e Raman). La formulazione di modelli microscopici dello stato liquido sia con metodi di dinamica molecolare classica che con metodi quantistici ab initio (Born-Oppenheimer e Car-Parrinello) ha potuto dimostrare il carattere eterogeneo della struttura di alcuni di questi liquidi. La presenza di domini polari e apolari è una caratteristica ricorrente nei liquidi costituiti da ioni con catene alchiliche e teste polari. La complessità strutturale di questi sistemi è emersa in particolare nei liquidi cosiddetti bioionici, composti da cationi e anioni di acidi inorganici, dove oltre alle interazioni elettrostatiche coulombiane e a quelle di van der Waals tra catene alifatiche, sono presenti forti interazioni di legame idrogeno. Queste, altamente specifiche direzionali, condizionano in modo critico la struttura locale degli ioni, possono portare alla formazione di coppie ioniche che, coordinandosi con altri ioni, possono generare unità stabili di dimensioni tali da originare "prepicchi" nella curva di diffrazione. Per sviluppare queste tematiche si è usufruito di numerosi grant sia presso il consorzio di supercalcolo CASPUR che presso il CINECA.

## Attività didattica

Il Prof. Ramondo dal 1994 al 1998, in qualità di ricercatore, ha tenuto seminari integrativi ed esercitazioni pratiche per gli insegnanti di Chimica Fisica, Laboratorio di Chimica Fisica e Chimica Generale ed Inorganica dei corsi di laurea in Scienze Biologiche e Scienze Ambientali.

Negli A.A. 1998-99, 1999-2000, 2000-2001 gli vengono affidati i seguenti corsi

-) Chimica Fisica per il Corso di Diploma Universitario in Scienza dei Materiali

-) Laboratorio di Chimica Fisica per il Corso di Laurea in Scienze Ambientali

Come Professore associato, dal 2002 ha tenuto continuamente gli insegnamenti di Chimica Fisica e Laboratorio di Chimica Fisica per il corso di laurea triennale in Scienze e Tecnologie Chimiche e dei Ma-

teriali. Dal 2000 al 2014 e dal 2017 al 2019 ha insegnato Chimica Teorica per il corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche.

-)Insegna Chimica Generale ed Inorganica con elementi di Organica per il corso di laurea in Scienze Geologiche dell'Università di Roma La Sapienza

## Supporto alla divulgazione scientifica

Revisore per le riviste internazionali:

Journal of Physical Chemistry A, B (American Chemical Society)

Journal of Chemical Physics (American Institute of Physics)

Structural Chemistry (Springer)

Journal of Molecular Structure (Elsevier)

Journal of Molecular Liquids (Elsevier)

Physical Chemistry Chemical Physics (Royal Society of Chemistry)

## Pubblicazioni su riviste scientifiche internazionali

## References