

Felice Grandinetti - Curriculum Vitæ

- **Notizie Generali**
- **Attività Scientifica**
- **Attività Didattica**
- **Elenco delle Pubblicazioni**
- **Elenco delle Attività Didattiche**

Informazioni generali

Felice Grandinetti è Professore Ordinario di Chimica Generale e Inorganica presso il Dipartimento per l'Innovazione nei Sistemi Biologici, Alimentari e Forestali (DIBAF) dell'Università della Tuscia. Nato nel 1962, si laurea in Chimica *cum laude* nel 1985 presso l'Università *La Sapienza* di Roma. Nel 1987 gli viene conferito il Premio *Giuseppe Stampacchia*, riservato alla prima pubblicazione scientifica di un giovane laureato in Chimica. Prima di entrare in ruolo all'Università della Tuscia (Professore Associato nel 1992 e Professore Ordinario nel 2000), è stato Ricercatore CNR presso l'Istituto di Chimica Nucleare dell'Area di Ricerca di Roma (1988-1992), e Professore a contratto presso l'Università *Gabriele D'Annunzio* di Chieti (1990-1992). Nel 1992 ha inoltre trascorso un periodo di studio e perfezionamento presso l'Università Tecnica di Berlino. Negli anni ha ricoperto presso la propria Università diversi incarichi istituzionali, tra i quali quello di Membro del Nucleo di Valutazione e Coordinatore della Sezione di Ricerca dello stesso Organo (1997-1999), di Presidente del Consiglio di Corso di Studio in Scienze Ambientali (2002-2005), di Membro del Consiglio di Amministrazione (2005-2008) e di Vice Direttore dell'ex Dipartimento di Scienze Ambientali (1996-2009). Dal 2013 è Delegato del Rettore per le attività di orientamento relative alla progettazione e gestione dei Tirocini Formativi Attivi (TFA), e dei Percorsi Formativi Abilitanti Speciali (PAS-TFA Speciale), e per la formazione iniziale e continua degli insegnanti.

Attività scientifica

Notizie generali

L'attività scientifica è iniziata nel 1986 presso il Dipartimento di Chimica dell'Università *La Sapienza* di Roma ed è proseguita, dal 1987 al 1992, presso l'Istituto di Chimica Nucleare del CNR e l'Università Tecnica di Berlino. Dal 1992 l'attività di ricerca è svolta (anche in collaborazione con diverse istituzioni italiane ed estere) presso l'Università degli Studi della Tuscia, prima presso il Dipartimento di Scienze Ambientali (fino al 2011), e poi presso il Dipartimento per l'Innovazione nei sistemi Biologici, Agroalimentari e Forestali (DIBAF). Questa attività è attualmente compendiate in 141 articoli a stampa su riviste internazionali ad ampia diffusione (autore corrispondente/di riferimento: 89 articoli, h-index 28, citazioni totali 2396), ed è stata supportata, negli anni, da vari contributi finanziari, inclusi quelli erogati dal Ministero dell'Università e della Ricerca. In particolare, Felice Grandinetti ha ricoperto il ruolo di Coordinatore Scientifico delle Unità di Ricerca di diversi Progetti PRIN, tra i quali PRIN 1997 (Struttura, meccanismo di formazione e reattività di ioni inorganici in fase gassosa, Finanziamento: 17.423 Euro), PRIN 1999 (Studio teorico e sperimentale sulla struttura, meccanismo di formazione e reattività di ioni inorganici in fase gassosa, Finanziamento: 40.284 euro), PRIN 2001 (Studio teorico e sperimentale sulla struttura, meccanismo di formazione e reattività di specie neutre e ioniche in fase gassosa, Finanziamento: 59.393 euro), PRIN 2003 (Studio teorico e sperimentale sulla struttura, meccanismo di formazione e reattività di specie neutre e ioniche in fase gassosa, Finanziamento: 44.500 Euro), PRIN 2005 (Studio teorico e sperimentale sulla struttura, meccanismo di formazione e reattività specie neutre e ioniche in fase gassosa, Finanziamento: 49.500 Euro) e PRIN 2007 (Struttura, stabilità e reattività di specie

neutre e ioniche in fase gassosa di interesse fondamentale ed atmosferico, Finanziamento: 58.000 Euro). Più recentemente, i suoi temi di ricerca hanno contribuito all'ammissione del DIBAF al programma "Dipartimenti di Eccellenza-2018" del MUR e, dal 2018, il lavoro di ricerca è finanziato attraverso il progetto DIBAF "Paesaggio 4.0 - Cibo, Benessere e Ambiente".

Temi di ricerca

Nel corso degli anni, l'attività scientifica è stata costantemente orientata verso lo studio della chimica in fase gassosa di specie inorganiche, la cui semplice composizione le rende di interesse generale, ed il cui studio ha inoltre implicazioni in ambito applicativo e ambientale. Grazie anche alla collaborazione con diversi gruppi di ricerca, il lavoro è stato tipicamente condotto attraverso l'uso integrato di metodi sperimentali, in particolare di tecniche di spettrometria di massa e di dispositivi a fasci molecolari, e calcoli quanto-meccanici, questi ultimi impiegati non solo per interpretare i dati sperimentali ma anche come strumento indipendente per la previsione di specie non ancora osservate o caratterizzate. Linee di ricerca tradizionalmente coltivate includono, in particolare, lo studio di specie ioniche e radicaliche derivanti dalla frammentazione di sostanze inorganiche fluorurate quali NF_3 , CF_4 , SiF_4 e GeF_4 , ampiamente utilizzate nell'industria elettronica, e lo studio di specie neutre e ioniche coinvolte nella chimica dell'atmosfera terrestre e delle atmosfere planetarie. Tipici sistemi investigati, includono, ad esempio, reazioni sperimentali in fase gassosa come modelli per l'attivazione accoppiata di CO/CO_2 e legami inerti CH e NH , prime evidenze sperimentali per la stabilità di ioni diazonio inorganici in fase gassosa, studi dettagliati sulla protonazione in fase gassosa e sulla fluorurazione ionica di semplici molecole inorganiche e lo studio teorico di specie ioniche di interesse per la chimica degli oggetti planetari. Notevole attenzione è stata inoltre costantemente rivolta negli anni alla chimica dei gas nobili. Questo è, in effetti, l'argomento attualmente indagato con maggiore interesse, stimolato anche dall'uso dell'elio superfluido quale matrice inerte per lo studio della struttura e della reattività chimica, e dal ruolo recentemente accertato delle specie ioniche dei gas nobili nella chimica dello spazio interstellare. I risultati ottenuti possono essere ricondotti a tre tematiche principali: a) osservazione sperimentale di nuove specie neutre e ioniche dei gas nobili e loro indagine teorica; b) previsione teorica di nuove specie dei gas nobili (neutre e ioniche) plausibilmente osservabili in diverse condizioni sperimentali; c) studio di composti di gas nobili come sistemi esemplificativi per indagare la natura del legame chimico. Esempi illustrativi riferibili alla tematica a) includono l'osservazione sperimentale di XeSiF_3^+ e XeGeF_3^+ (prime specie molecolari sperimentalmente osservate contenenti legami Xe-Si e Xe-Ge), di XeNF_2^+ (un primo esempio di ione xeno-nitrenio in fase gassosa), e $\text{He}(\text{CCl}_4)$ e $\text{Ne}(\text{CCl}_4)$, rari esempi documentati di complessi neutri dell'elio e del neon caratterizzati da un'interazione stabilizzante con una componente di carattere chimico (trasferimento di carica). Specie illustrative del tema b) includono i cationi NgBeF^+ ($\text{Ng} = \text{He}, \text{Ne}, \text{Ar}$), esempi previsti di ioni adatti alla preparazione di sali dei gas nobili più leggeri, il complesso HeBO^+ quale catione singolarmente carico dell'elio caratterizzato da una stabilità eccezionalmente elevata, e un'ampia serie di composti neutri dell'elio contenenti un elevato numero di atomi di He. Infine, esempi riferibili alla tematica c) sono una serie di studi teorici strettamente correlati volti ad indagare la situazione di legame dei composti dei gas nobili. L'approccio adottato si basa sull'analisi topologica

della densità di energia elettronica, i cui risultati hanno permesso di ottenere una classificazione generale dei legami chimici che coinvolgono gli atomi di gas nobili. Sulla base dell'analisi grafica della densità di energia elettronica, e di indici quantitativi opportunamente definiti, il metodo distingue in maniera efficace interazioni covalenti, non covalenti e parzialmente covalenti. L'approccio è, inoltre, apparentemente applicabile a qualsiasi composto chimico, e questo suggerisce prospettive interessanti nello studio del legame chimico, con particolare riferimento all'indagine delle interazioni non covalenti. I risultati ottenuti dallo studio della chimica dei gas nobili sono riportata in circa quaranta articoli originali, rassegne e saggi e nel libro "Noble Gas Chemistry: Structure, Bonding, and Gas-Phase Chemistry" pubblicato da Wiley nel 2018. Questa monografia fornisce una rassegna aggiornata delle diverse tecniche sperimentali e metodi teorici attualmente impiegati nello studio della chimica dei gas nobili, in particolare dei processi in fase gassosa.

Attività didattica

Dal 1990 Felice Grandinetti ha ininterrottamente svolto la didattica di Corsi di Chimica per studenti di classi diverse (Biologia e Biotecnologie, Scienze Ambientali e Naturali, Scienze Agrarie e Forestali, Farmacia e Conservazione dei Beni Culturali). È stato inoltre relatore di studenti del Corso di Dottorato in Scienze Ambientali dell'Università degli Studi della Toscana. Di seguito alcuni esempi di Corsi erogati.

1. Corso di "Chimica Generale e Inorganica", Università degli Studi della Toscana, Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Ambientali
2. Corso di "Chimica Generale e Inorganica", Università degli Studi della Toscana, Facoltà di Agraria, Corsi di Laurea in Scienze Agrarie e in Scienze Forestali
3. Corso di "Laboratorio di Chimica", Università degli Studi della Toscana, Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Biologiche
4. Corso di "Chimica Generale e Inorganica", Università degli Studi della Toscana, Dipartimento di Scienze Ecologiche e Biologiche (DEB), Corso di Laurea in Scienze Biologiche
5. Corso di "Chimica Generale e Inorganica", Università degli Studi della Toscana, Dipartimento per l'Innovazione nei Sistemi Biologici, Alimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Laurea in Biotecnologie
6. Corso di "Catalisi Chimica", Università degli Studi della Toscana, Dipartimento per l'Innovazione nei Sistemi Biologici Alimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Laurea Magistrale in Biotecnologie per l'Agricoltura, l'Ambiente e la Salute.
7. Corso di "Chimica Generale e Inorganica", Istituto Centrale per il Restauro e la Conservazione del Patrimonio Archivistico e Librario, Roma, Corso di Laurea Magistrale in Conservazione e Restauro dei Beni Culturali
8. Corso di "Chimica Inorganica e Mineralogica", Università degli Studi della Toscana, Dipartimento di Scienze dei Beni Culturali (DISBEC), Corso di Laurea in Conservazione e Restauro dei Beni Culturali.

Publications List

141. C. Zazza, N. Sanna, S. Borocci, F. Grandinetti, ' On the supramolecular interactions into a pH- and metal-actuated molecular shuttle: some insights from QTAIM modeling', *ChemPhysChem*, **2024**, submitted
140. C. Zazza, N. Sanna, S. Borocci, F. Grandinetti, 'Optical and supramolecular properties of cyclometalated palladium nanostructures with tumor targeting properties in living mice: a quantum mechanics interpretation', *ChemPhysChem*, **2024**, in press
139. S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, C. Zazza, 'Noble gas anions: an overview of strategies and bonding motifs', *Chemistry – An Asian Journal*, **2024**, e202400191.
138. S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, C. Zazza, 'On the conformational shaping of a visible light-driven molecular motor based on barbituric acid in solvents of increasing polarity', *Chemical Physics Letters*, **2024**, 842, 141205.
137. S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, C. Zazza, 'Noble gas hydrides: theoretical prediction of the first group of anionic species', *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2024**, 26, 7377-7387.
136. S. Borocci, A. Camerlingo, M. Rutigliano, F. Grandinetti, N. Sanna, 'Complexes of the noble-gas atoms with borazine: theoretical insights into structure, stability, and bonding character', *Chemical Physics Letters*, **2024**, 834, 140985.
135. S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, 'Complexes of NgHNg⁺ (Ng = He, Ne, Ar) with He: theoretical insights into structure, stability, and bonding character', *Chemical Physics Letters*, **2023**, 819, 140443.
134. S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, 'Noble gas-silicon cations: theoretical insights into the nature of the bond', *Molecules*, **2022**, 27, 4592.
133. F. Grandinetti, '60 years of chemistry of the noble gases', *Nature*, **2022**, 606, 659-661.
132. S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, 'Noble gas compounds: A general procedure of bonding analysis', *The Journal of Chemical Physics*, **2022**, 156, 014104.
131. S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, 'Concerning the role of σ -Hole in non-covalente interactions: insights from the study of the complexes of ArBeO with simple ligands', *Molecules*, **2021**, 26, 4477.
130. S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, 'On the proton-bound noble gas dimers (Ng-H-Ng)⁺ and (Ng-H-Ng')⁺ (Ng, Ng' = He-Xe): relationships between structure, stability, and bonding character', *Molecules*, **2021**, 26, 1305.

129. S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, 'From $L\text{Ar}$ to $L\text{-ArBeO}$ ($L = \text{He, Ne, Ar, HF}$): switching on σ -hole effects in non-covalent interactions', *Chemical Physics Letters*, **2021**, 768, 138402.
128. S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, F. Nunzi, 'Classifying the chemical bonds involving the noble-gas atoms', *New Journal of Chemistry*, **2020**, 44, 14536-14550.
127. F. Grandinetti, 'Cationic noble-gas hydrides: from ion sources to outer space', *Frontiers in Chemistry*, **2020**, 8, 462.
126. S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, 'Complexes of the noble-gas atoms with unsaturated ions: a theoretical investigation on the exemplary $(\text{H}_2\text{C}=\text{NH}_2^+)\text{Ar}$ ', *Chemical Physics Letters*, **2020**, 752, 137532.
125. S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, P. Antoniotti, F. Nunzi, 'Complexes of helium with neutral molecules: progress toward a quantitative scale of bonding character', *Journal of Computational Chemistry*, **2020**, 41, 1000-1011.
124. S. Borocci, F. Grandinetti, N. Sanna, P. Antoniotti, F. Nunzi, 'Non-covalent complexes of the noble-gas atoms: analyzing the transition from physical to chemical interactions', *Journal of Computational Chemistry*, **2019**, 40, 2318-2328.
123. F. Nunzi, D. Cesario, F. Pirani, L. Belpassi, G. Frenking, F. Grandinetti, F. Tarantelli, 'Helium accepts back-donation in highly polar complexes: new insights into the weak chemical bond', *The Journal of Physical Chemistry Letters*, **2017**, 8, 3334-3340.
122. P. Antoniotti, P. Benzi, S. Borocci, C. Demaria, M. Giordani, F. Grandinetti, L. Operti, R. Rabezzana, 'Bimolecular homolytic substitutions at nitrogen: an experimental and theoretical study on the gas phase reactions of alkyl radicals with NF_3 ', *Chemistry - A European Journal*, **2015**, 21, 15825-15834.
121. S. Borocci, P. Cecchi, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Complexes of the noble gases with H_3O^+ : a theoretical investigation on $\text{Ng}(\text{H}_3\text{O}^+)$ ($\text{Ng} = \text{He-Xe}$)', *European Journal of Mass Spectrometry*, **2015**, 21, 171-181.
120. S. Borocci, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Bonding motifs of noble-gas compounds as described by the local electron energy density', *The Journal of Physical Chemistry A* **2015**, 119, 6528-6541.
119. A. Filippi, C. Fraschetti, F. Grandinetti, M. Speranza, S. Stranges, A. Ponzi, P. Decleva, 'Electronic structure and conformational flexibility of D-cycloserine', *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2015**, 17, 25845-25853.
118. A. Bartocci, L. Belpassi, D. Cappelletti, S. Falcinelli, F. Grandinetti, F. Tarantelli, F. Pirani, 'Catching the role of anisotropic electronic distribution and charge transfer in halogen bonded complexes of noble gases', *The Journal of Chemical Physics*, **2015**, 142, 184304.

117. D. Cappelletti, A. Bartocci, F. Grandinetti, S. Falcinelli, L. Belpassi, F. Tarantelli, F. Pirani, 'Experimental evidence of chemical components in the bonding of helium and neon with neutral molecules', *Chemistry – A European Journal*, **2015**, *21*, 6234-6240.
116. S. Borocci, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Complexes of XeHXe⁺ with simple ligands: a theoretical investigation on (XeHXe⁺)L (L = N₂, CO, H₂O, NH₃)', *The Journal of Physical Chemistry A* **2015**, *119*, 2383-2392.
115. S. Borocci, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Neutral compounds with xenon-germanium bonds: a theoretical investigation on FXeGeF and FXeGeF₃', *The Journal of Physical Chemistry A* **2014**, *118*, 3326-3334.
114. P. Antoniotti, P. Benzi, L. Operti, R. Rabezzana, S. Borocci, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Ion chemistry of sulfuranyl fluoride: an experimental and theoretical study on gas-phase reactions involving neutral and ionized SO₂F₂', *International Journal of Mass Spectrometry*, **2013**, *354-355*, 46-53.
113. P. Antoniotti, P. Benzi, E. Bottizzo, L. Operti, R. Rabezzana, S. Borocci, M. Giordani, F. Grandinetti, '(HNg⁺)(OH₂) complexes (Ng = He-Xe): an *ab initio* and DFT theoretical investigation', *Computational and Theoretical Chemistry*, **2013**, *1017*, 117-125.
112. F. Grandinetti, 'Neon behind the signs', *Nature Chemistry*, **2013**, *5*, 438.
111. P. Antoniotti, P. Benzi, E. Bottizzo, L. Operti, R. Rabezzana, S. Borocci, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Germeryl cations with Ge-S bonds: an experimental and theoretical study on the gaseous F_nGe(SH)_{3-n}⁺ (n = 0-2)', *European Journal of Mass Spectrometry*, **2012**, *18*, 447-456.
110. P. Antoniotti, P. Benzi, E. Bottizzo, L. Operti, R. Rabezzana, S. Borocci, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Gaseous germeryl cations: a theoretical investigation on the structure, properties, and mechanism of formation of F_nGe(OH)_{3-n}⁺ and F_nGe(NH₂)_{3-n}⁺ (n = 0-2)', *Computational and Theoretical Chemistry*, **2012**, *993*, 131-139.
109. P. Antoniotti, E. Bottizzo, S. Borocci, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Gas-phase reactions of SiH_n⁺ (n = 1,2) with NF₃: a computational investigation on the detailed mechanistic aspects', *Journal of Computational Chemistry*, **2012**, *33*, 1918-1926.
108. F. Grandinetti, 'Gas-phase ion chemistry of the noble gases: recent advances and future perspectives', *European Journal of Mass Spectrometry*, **2011**, *17*, 423-463.
107. L. Operti, R. Rabezzana, F. Turco, S. Borocci, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Xenon-Nitrogen Chemistry: Gas-phase Generation and Theoretical Investigation of the Xenon-Difluoronitrenium Ion F₂N-Xe⁺', *Chemistry – A European Journal*, **2011**, *17*, 10682-10689.

106. L. Operti, R. Rabezzana, F. Turco, S. Borocci, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Positive ion chemistry of SiH₄/GeF₄ gaseous mixtures studied by ion trap mass spectrometry and *ab initio* calculations', *European Journal of Mass Spectrometry*, **2011**, *17*, 197-206.
105. P. Antoniotti, E. Bottizzo, L. Operti, R. Rabezzana, S. Borocci, F. Grandinetti, 'Gas-phase chemistry of ionized and protonated GeF₄: a joint experimental and theoretical study', *Journal of Mass Spectrometry*, **2011**, *46*, 465-477.
104. S. Borocci, N. Bronzolino, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Cationic noble gas hydrides-2: A theoretical investigation on HNgHNgH⁺ (Ng = Ar, Kr, Xe)', *Computational and Theoretical Chemistry*, **2011**, *964*, 318-323.
103. P. Antoniotti, E. Bottizzo, L. Operti, R. Rabezzana, S. Borocci, F. Grandinetti, 'F₃Ge-Xe⁺: a xenon-germanium molecular species', *The Journal of Physical Chemistry Letters*, **2010**, *1*, 2006-2010.
102. S. Borocci, N. Bronzolino, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Cationic noble gas hydrides: a theoretical investigation on the dinuclear HNgFNgH⁺ (Ng = He-Xe)', *The Journal of Physical Chemistry A* **2010**, *114*, 7382 - 7390.
101. P. Antoniotti, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Stabilization of HHeF by complexation: is it a really viable strategy?', *Chemistry - A European Journal*, **2010**, *16*, 6257 - 6264.
100. P. Antoniotti, L. Operti, R. Rabezzana, F. Turco, C. Zanzottera, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Gas-phase reactions of XH₃⁺ (X = C, Si, Ge) with NF₃: a Comparative Investigation on the Detailed Mechanistic Aspects', *Journal of Mass Spectrometry*, **2009**, *44*, 1348-1358.
99. M. Giordani, F. Grandinetti, 'Protonated MF₃ (M = N-Bi): structure, stability, and thermochemistry of the H-MF₃⁺ and HF-MF₂⁺ isomers', *Journal of Fluorine Chemistry*, **2009**, *130*, 557-561
98. N. Bronzolino, S. Borocci, F. Grandinetti, 'Noble gas-selenium molecular species: a theoretical investigation of FNgSe⁻ (Ng = He-Xe)', *Chemical Physics Letters*, **2009**, *470*, 49-53.
97. P. Antoniotti, L. Operti, R. Rabezzana, F. Turco, G.A. Vaglio, F. Grandinetti, 'Ion/molecule reactions in SiH₄/H₂S and GeH₄/H₂S mixtures', *Journal of Mass Spectrometry*, **2009**, *44*, 725-734.
96. P. Antoniotti, L. Operti, R. Rabezzana, F. Turco, S. Borocci, F. Grandinetti, 'Positive ion chemistry of SiH₄/NF₃ gaseous mixtures studied by ion trap mass spectrometry', *European Journal of Mass Spectrometry*, **2009**, *15*, 209-220.

95. N. Bronzolino, S. Borocci, F. Grandinetti, 'Noble gas-sulphur anions: a theoretical investigation of FNgS⁻ (Ng = He, Ar, Kr, Xe)', *Chemical Physics Letters*, **2008**, 458, 48-53.
94. P. Antoniotti, R. Rabezzana, F. Turco, S. Borocci, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Ion chemistry in germane/fluorocompounds gaseous mixtures: a mass spectrometric and theoretical study', *Journal of Mass Spectrometry*, **2008**, 43, 1320-1333.
93. P. Antoniotti, S. Borocci, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Cl-initiated oxidation of N-ethyl-perfluoroalkanesulfonamides: a theoretical insight into the experimentally observed products', *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)*, **2008**, 857, 57-65.
92. P. Antoniotti, N. Bronzolino, S. Borocci, P. Cecchi, F. Grandinetti, 'Noble gas anions: theoretical investigation of FNgBN⁻ (Ng = He-Xe)', *The Journal of Physical Chemistry A*, **2007**, 111, 10144-10151.
91. P. Antoniotti, R. Rabezzana, F. Turco, N. Bronzolino, S. Borocci, F. Grandinetti, 'Gas-phase ion chemistry of NF₃/SO₂ mixtures: a joint experimental and theoretical study', *International Journal of Mass Spectrometry*, **2007**, 266, 86-91.
90. S. Borocci, N. Bronzolino, F. Grandinetti, 'Noble gas complexes: theoretical investigation of multicenter polynuclear species', *Helvetica Chimica Acta*, **2007**, 90, 1335-1352.
89. A.M. Timperio, M. Fagioni, F. Grandinetti, L. Zolla, 'Chemically-enhanced liquid chromatography/tandem mass spectrometry determination of glutamic acid in the diffusion medium of retinal cells', *Biomedical Chromatography*, **2007**, 21, 1069-1076.
88. P. Antoniotti, S. Borocci, N. Bronzolino, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Cationic germanium fluorides. 2. An experimental and theoretical investigation on the reaction between GeF⁺ and H₂O', *International Journal of Mass Spectrometry*, **2006**, 257, 50-59.
87. P. Antoniotti, S. Borocci, N. Bronzolino, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Ge₃H_n⁻ anions (n = 0-5) and their neutral analogues: a theoretical investigation on the structure, stability, and thermochemistry', *The Journal of Physical Chemistry A*, **2006**, 110, 9429-9437.
86. P. Antoniotti, S. Borocci, N. Bronzolino, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Fluoromethyl cations and group XIV congeners AH_nF_{3-n}⁺ (A = Si, Ge, Sn, Pb; n = 0-2): from covalent structures to ion-molecule complexes', *European Journal of Inorganic Chemistry*, **2006**, 3010-3015.

85. S. Borocci, N. Bronzolino, F. Grandinetti, 'Neutral helium compounds: theoretical evidence for a large class of polynuclear complexes', *Chemistry - A European Journal*, **2006**, *12*, 5033-5042.
84. P. Antoniotti, S. Borocci, N. Bronzolino, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Cationic germanium fluorides: a theoretical investigation on the structure, stability, and thermochemistry of $\text{GeF}_n/\text{GeF}_n^+$ ($n = 1-3$)', *The Journal of Physical Chemistry A*, **2006**, *110*, 4900-4905.
83. S. Borocci, N. Bronzolino, M. Giordani, F. Grandinetti, 'Ligation of Be^+ and Mg^+ to NF_3 : structure, stability, and thermochemistry of the $\text{Be}^+(\text{NF}_3)$ and $\text{Mg}^+(\text{NF}_3)$ complexes', *International Journal of Mass Spectrometry*, **2006**, *255/256*, 11-19.
82. S. Borocci, N. Bronzolino, F. Grandinetti, 'From OBeHe to H_3BOBeHe : enhancing the stability of a neutral helium compound', *Chemical Physics Letters*, **2005**, *406*, 179-183.
81. P. Antoniotti, S. Borocci, F. Grandinetti, 'Comment on Computational investigation of $\text{SO}_3\text{-NH}_{3-n}\text{X}_n$ ($n = 0-3$; $\text{X} = \text{F}, \text{Cl}$) interactions', *The Journal of Physical Chemistry A*, **2005**, *109*, 2410-2411.
80. S. Borocci, N. Bronzolino, F. Grandinetti, ' OBHe^+ : a remarkably stable singly charged cation containing helium', *Chemical Physics Letters*, **2004**, *398*, 357-360.
79. F. Grandinetti, 'Helium chemistry: a survey of the role of the ionic species', *International Journal of Mass Spectrometry*, **2004**, *237*, 243-267.
78. P. Antoniotti, S. Borocci, N. Bronzolino, F. Grandinetti, 'A computational investigation of HCN_2^+ isomeric structures: implications for the chemistry of Titan's atmosphere', *ChemPhysChem*, **2004**, *5*, 1345-1351.
77. S. Borocci, N. Bronzolino, F. Grandinetti, ' FN^+Cl ions from ionized F_2NCl : a computational investigation on the structure and reactivity toward H_2O ', *Helvetica Chimica Acta*, **2004**, *87*, 1467-1482.
76. P. Antoniotti, S. Borocci, F. Grandinetti, 'Nitrogen trifluoride as a bifunctional Lewis base: implications for the adsorption of NF_3 on solid surfaces', *European Journal of Inorganic Chemistry*, **2004**, 1125-1130.
75. S. Borocci, N. Bronzolino, F. Grandinetti, ' SBeNg , SBNg^+ , and SCNg^{2+} complexes ($\text{Ng} = \text{He}, \text{Ne}, \text{Ar}$): a computational investigation on the structure and stability', *Chemical Physics Letters*, **2004**, *384*, 25-29.
74. N. Bronzolino, F. Grandinetti, 'A computational investigation on the Lewis acidity of fluoro- and chloronitrenium ions', *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)*, **2003**, *635*, 221-227.

73. A. Filippi, G. Roselli, G. Renzi, F. Grandinetti, M. Speranza, 'Isomeric alkyl cation/arene complexes in the gas phase', *Chemistry – A European Journal*, **2003**, *9*, 2072-2078.
72. P. Antoniotti, P. Facchini, F. Grandinetti, 'Beryllium-helium cations: computational evidence for a large class of thermodynamically stable species', *International Journal of Mass Spectrometry*, **2003**, *228*, 415-427.
71. P. Antoniotti, P. Facchini, F. Grandinetti, 'FSO⁺ and FSO₂⁺ ions from ionized sulfur oxyfluorides: a computational investigation on the structure, stability, and thermochemistry', *Chemical Physics Letters*, **2003**, *372*, 455-463.
70. P. Antoniotti, N. Bronzolino, F. Grandinetti, 'Stable compounds of the lightest noble gases: a computational investigation on RNBeNg (Ng = He, Ne, Ar)', *The Journal of Physical Chemistry A*, **2003**, *107*, 2974-2980.
69. P. Facchini, F. Grandinetti, 'Concerning the reaction between singlet nitrenium ions and water: a computational investigation on competitive reaction paths', *Journal of Computational Chemistry*, **2003**, *24*, 547-564.
68. P. Antoniotti, F. Grandinetti, 'A computational investigation on the mechanism of the reaction between O(¹D) and NF₃', *Chemical Physics Letters*, **2002**, *366*, 676-682.
67. F. Grandinetti, 'Inorganic nitrenium ions: formation, structure, and reactivity in the gas phase', *Recent Research Developments in Molecular Structure*, **2002**, *1*, 23-40.
66. F. Grandinetti, V. Vinciguerra, 'Adducts of NF₂⁺ with diatomic and simple polyatomic ligands: a computational investigation on the structure, stability, and thermochemistry', *International Journal of Mass Spectrometry*, **2002**, *216*, 285-299.
65. F. Grandinetti, V. Vinciguerra, 'Complexes of lithium cation with nitrogen trifluoride: a computational investigation on the structure and stability of Li⁺-(NF₃) isomers', *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)*, **2001**, *574*, 185-193.
64. M. Aschi, F. Grandinetti, 'The unimolecular loss of HF by simple inorganic ions: a computational dynamic reaction path study', *European Journal of Mass Spectrometry*, **2000**, *6*, 31-37.
63. M. Aschi, F. Grandinetti, 'Spin-forbidden F⁺ transfer between ²NF⁺ and CO: a computational study on the detailed mechanistic aspects', *International Journal of Mass Spectrometry*, **2000**, *201*, 151-160.

62. M. Aschi, F. Grandinetti, 'FBeNg⁺ (Ng = He, Ne, and Ar): suitable cations for salts of the lightest noble gases?', *Angewandte Chemie International Edition*, **2000**, *39*, 1690-1692.
61. G. Renzi, G. Roselli, F. Grandinetti, A. Filippi, M. Speranza, 'Eliminative ring opening of oxiranium ions in the gas phase', *Angewandte Chemie International Edition*, **2000**, *39*, 1673-1676.
60. M. Aschi, F. Grandinetti, 'The ionization potential of NF₃: a G3 computational study on the thermochemical properties of NF_x and NF_x⁺ (x = 1-3)', *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)*, **2000**, *497*, 205-209.
59. A. Filippi, F. Grandinetti, G. Occhiucci, M. Speranza, 'Formation and structural discrimination of stable halophenylum ions in the gas phase', *International Journal of Mass Spectrometry*, **2000**, *195/196*, 21-31.
58. M. Aschi, F. Grandinetti, 'Unimolecular decay of the thiomethoxy cation, CH₃S⁺: a computational study on the detailed mechanistic aspects', *The Journal of Chemical Physics*, **1999**, *111*, 6759-6768.
57. M. Aschi, F. Grandinetti, 'Carbonylation of ammonia by gaseous FCO⁺. A G2 and Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus study of the detailed mechanistic aspects', *International Journal of Mass Spectrometry*, **1999**, *184*, 89-101.
56. M. Aschi, F. Grandinetti, V. Vinciguerra, 'Mechanistic aspects of F⁺ transfer reactions: a model study in the gas phase', *Chemistry - A European Journal*, **1998**, *4*, 2366-2374.
55. F. Grandinetti, P. Cecchi, V. Vinciguerra, 'Protonated NF₃O. A G2MS theoretical study on the structure, stability, and interconversion of the (NF₃O)H⁺ isomers', *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes*, **1998**, *175*, 317-324.
54. A. Troiani, F. Gasparrini, F. Grandinetti, M. Speranza, 'Chiral ions in the gas phase. 1. Intramolecular racemization and isomerization of O-protonated (S)-trans-4-hexen-3-ol', *The Journal of the American Chemical Society*, **1997**, *119*, 4525-4534.
53. M. Aschi, F. Grandinetti, 'Gaseous protonated nitrosamide. A G2 theoretical study on the structure, stability, and interconversion of (H₂N-NO)H⁺ isomers', *Chemical Physics Letters*, **1997**, *267*, 98-104.
52. F. Grandinetti, P. Cecchi, V. Vinciguerra, 'Methylated NF₃. A G2MS theoretical study on the structure, stability, and interconversion of the CH₃-NF₃⁺ and CH₃F-NF₂⁺ isomers', *Chemical Physics Letters*, **1997**, *281*, 431-437.

51. M. Aschi, F. Grandinetti, 'Protonated methyl nitrite. A theoretical investigation on the structure and stability of $(\text{MeO-NO})\text{H}^+$ and the proton affinity of RO-NO (R = H, Me)', *Chemical Physics Letters*, **1996**, 258, 123-128.
50. F. Grandinetti, A. Ricci, 'Protonated thiohypofluorous acid, FSH_2^+ . Theoretically predicted to be stable and experimentally observed in the gas phase', *Chemical Physics Letters*, **1996**, 253, 189-195.
49. F. Grandinetti, F. Pepi, A. Ricci, 'Ionic fluorination of carbon monoxide as a route to gas-phase carbonylation of inert C-H and N-H bonds', *Chemistry - A European Journal*, **1996**, 2, 495-501.
48. P. Cecchi, M.E. Crestoni, F. Grandinetti, V. Vinciguerra, 'Activation of carbon dioxide by coordination with cations in the gas phase: SiF_3^+ -mediated coupling of CO_2 and aromatic C-H bonds', *Angewandte Chemie International Edition English*, **1996**, 35, 2522-2524.
47. P. Antoniotti, F. Grandinetti, P. Volpe, 'Structure and stability of isomeric C_2GeH_7^+ ions. An ab initio post-SCF study', *The Journal of Physical Chemistry*, **1995**, 99, 17724-17728.
46. R. Cipollini, F. Grandinetti, 'The gaseous trifluorosilylxenon cation, F_3SiXe^+ : a stable species with a silicon-xenon bond', *Journal of Chemical Society, Chemical Communication*, **1995**, 773-774.
45. F. Cacace, F. Grandinetti, F. Pepi, 'Gaseous fluorodiazonium ions. Experimental and theoretical study on formation and structure of FN_2^+ ', *Inorganic Chemistry*, **1995**, 34, 1325-1332.
44. F. Grandinetti, M. Speranza, 'Uncommon electronic effects on the gas-phase Brønsted acidity of isomeric hydroxyphenylium ions', *Chemical Physics Letters*, **1994**, 229, 581-586
43. P. Antoniotti, P. Benzi, P. Volpe, F. Grandinetti, 'An ab initio study on the structure and stability of $(\text{C}_2\text{H}_5\text{Ge})^+$ ', *Applied Radiation and Isotopes*, **1994**, 45, 387-388.
42. F. Cacace, F. Grandinetti, F. Pepi, 'Experimental observation of stable cyanodiazonium ions, NC-N_2^+ ', *Journal of Chemical Society, Chemical Communication*, **1994**, 2173-2174.
41. F. Cacace, F. Pepi, F. Grandinetti, 'Gaseous F_2NO^+ cations from the addition of NF_2^+ to N_2O . Structure and mechanism of formation', *The Journal of Physical Chemistry*, **1994**, 98, 8009-8013.
40. M. Aschi, F. Grandinetti, F. Pepi, 'The addition of NF_2^+ to H_2O as a route to gaseous protonated F_2NOH ', *International Journal of Mass Spectrometry Ion Processes*, **1994**, 130, 117-125.

39. M. Aschi, F. Cacace, F. Grandinetti, F. Pepi, 'Gaseous protonated nitrosyl fluoride. Experimental and theoretical characterization of two distinguishable isomers, HONF^+ and ONFH^+ , and evaluation of the barrier for their interconversion', *The Journal of Physical Chemistry*, **1994**, *98*, 2713-2718.
38. F. Cacace, F. Grandinetti, F. Pepi, 'An extraordinarily violent molecular dissociation: the unprecedented kinetic energy release in the decomposition of HONF^+ , a singly charged metastable ion', *Angewandte Chemie International Edition English*, **1994**, *33*, 123-125.
37. F. Grandinetti, M.E. Crestoni, S. Fornarini, M. Speranza, 'Ionic Lewis superacids in the gas phase. Part 4. CF_3^+ initiated ion/molecule reaction patterns in the γ -radiolysis of CF_4/n -bases gaseous mixtures', *International Journal of Mass Spectrometry Ion Processes*, **1994**, *130*, 207-222.
36. F. Grandinetti, G. Occhiucci, M.E. Crestoni, S. Fornarini, M. Speranza, 'Ionic Lewis superacids in the gas phase. Part 3. Reactions of gaseous CF_3^+ with nitrogen bases', *International Journal of Mass Spectrometry Ion Processes*, **1993**, *127*, 137-146.
35. F. Grandinetti, G. Occhiucci, M.E. Crestoni, S. Fornarini, M. Speranza, 'Ionic Lewis superacids in the gas phase. Part 2. Reactions of gaseous CF_3^+ with oxygen bases', *International Journal of Mass Spectrometry Ion Processes*, **1993**, *127*, 123-135.
34. F. Grandinetti, G. Occhiucci, O. Ursini, G. de Petris, M. Speranza, 'Ionic Lewis superacids in the gas phase. Part 1. Ionic intermediates from the attack of gaseous SiF_3^+ on n -bases', *International Journal of Mass Spectrometry Ion Processes*, **1993**, *124*, 21-36.
33. M. Attinà, F. Cacace, E. Ciliberto, G. de Petris, F. Grandinetti, F. Pepi, A. Ricci, 'Gas-phase ion chemistry of nitramide. A Mass spectrometric and ab initio study of $\text{H}_2\text{N-NO}_2$ and the $\text{H}_2\text{N-NO}_2^+$, $[\text{H}_2\text{N-NO}_2]\text{H}^+$, and $[\text{HN-NO}_2]^-$ ions', *The Journal of the American Chemical Society*, **1993**, *115*, 12398-12404.
32. P. Cecchi, A. Pizzabiocca, G. Renzi, F. Grandinetti, C. Sparapani, P. Buzek, P.v.R. Schleyer, M. Speranza, 'Gas-phase protonation of spiro-pentane. A novel entry into the C_5H_9^+ potential energy surface', *The Journal of the American Chemical Society*, **1993**, *115*, 10338-10347.
31. F. Grandinetti, 'Gas-phase protonation of simple inorganic molecules: a stimulating interplay between theory and experiment', *Organic Mass Spectrometry*, **1993**, *28*, 1504-1511.
30. P. Antoniotti, P. Benzi, F. Grandinetti, P. Volpe, 'Structure and stability of various $(\text{C}_2\text{H}_5\text{Ge})^+$ ions. An ab initio molecular orbital study', *The Journal of Physical Chemistry*, **1993**, *97*, 4945-4950.

29. F. Cacace, G. de Petris, F. Grandinetti, G. Occhiucci, 'Gas-phase ion chemistry of cyanamide. A mass spectrometric and ab initio study of gaseous $[\text{H}_2\text{N-CN}]^+$, $[\text{H}_2\text{N-CN}]\text{H}^+$, and $[\text{HN-CN}]^-$ ions', *The Journal of Physical Chemistry*, **1993**, *97*, 4239-4245.
28. F. Grandinetti, J. Hrušák, H. Schwarz, 'The NF_2H^+ and NH_2F^+ radical cations: conventional structures or ion-molecule complexes? A GAUSSIAN-1 study', *Chemical Physics Letters*, **1993**, *204*, 53-58.
27. F. Cacace, M. Attinà, M. Speranza, G. de Petris, F. Grandinetti, 'Concerning the proton affinity of hydrazoic acid and methyl nitrate', *The Journal of Organic Chemistry*, **1993**, *58*, 3639-3642.
26. M. Attinà, F. Cacace, F. Grandinetti, G. Occhiucci, A. Ricci, 'Positive ion chemistry of gaseous boric and polyboric acids', *International Journal of Mass Spectrometry Ion Processes*, **1992**, *117*, 47-63.
25. F. Grandinetti, L. Bencivenni, F. Ramondo, 'Structure and stability of H_4NO_4^+ ions. An ab initio theoretical investigation', *The Journal of Physical Chemistry*, **1992**, *96*, 4354-4358.
24. D. Schröder, F. Grandinetti, J. Hrušák, H. Schwarz, 'Experimental and ab initio MO studies on $[\text{H}_2\text{N,O}]^+$ ions in the gas phase: characterization of the isomers H_2NO^+ , HNOH^+ , and NOH_2^+ and the mechanism of unimolecular dehydrogenation of $[\text{H}_2\text{N,O}]^+$ ', *The Journal of Physical Chemistry*, **1992**, *96*, 4841-4845.
23. F. Grandinetti, J. Hrušák, D. Schröder, H. Schwarz, 'Gas-phase protonation of HNO. A Gaussian-1 ab initio MO study of the structure, stability, and unimolecular interconversion processes of various $[\text{H}_2\text{N,O}]^+$ isomers', *The Journal of Physical Chemistry*, **1992**, *96*, 2100-2103.
22. F. Grandinetti, J. Hrušák, D. Schröder, S. Karrass, H. Schwarz, 'Nitrogen versus fluorine protonation of NF_3 in the gas phase. A combined mass spectrometric and GAUSSIAN-1 ab initio MO study reveals the existence of two distinct isomers F_3NH^+ and $\text{F}_2\text{N-FH}^+$ ', *The Journal of the American Chemical Society*, **1992**, *114*, 2806-2810.
21. G. de Petris, A. Di Marzio, F. Grandinetti, ' H_2NO_2^+ ions in the gas phase. A mass spectrometric and post-SCF ab initio study', *The Journal of Physical Chemistry*, **1991**, *95*, 9782-9787.
20. R. Bucci, F. Grandinetti, A. Filippi, G. Laguzzi, G. Occhiucci, M. Speranza, 'Gas-phase heteroaromatic substitution. 13. A quantitative application of the curve-crossing reactivity model to heteroaromatic substitution', *The Journal of the American Chemical Society*, **1991**, *113*, 4550-4557.

19. F. Ramondo, N. Sanna, L. Bencivenni, F. Grandinetti, 'Ab initio study on the radical anions SO_3^- and CO_2^- and on the charge-transfer complexes MSO_3 and MCO_2 ($\text{M} = \text{Li}, \text{Na}$)', *Chemical Physics Letters*, **1991**, 180, 369-380.
18. M. Attinà, F. Cacace, A. Ricci, F. Grandinetti, G. Occhiucci, 'Gas-phase ion chemistry of H_3BO_3 . Protonated orthoboric, metaboric and polyboric acids, and their anions in the gas phase', *Journal of Chemical Society, Chemical Communications*, **1991**, 66-68.
17. P. Antoniotti, F. Grandinetti, 'The protonation of germanium monoxide, GeO , and germanone, H_2GeO . An ab initio SCF study', *Gazzetta Chimica Italiana*, **1990**, 120, 701-704.
16. F. Cacace, M. Attinà, G. de Petris, F. Grandinetti, M. Speranza, 'Gaseous isomeric H_2N_3^+ ions. A joint ab initio and mass spectrometric study of protonated hydrazoic acid', *Gazzetta Chimica Italiana*, **1990**, 120, 691-700.
15. F. Ramondo, L. Bencivenni, F. Grandinetti, 'The geometries and vibrational patterns of LiClO_3 and NaClO_3 ion pairs: an ab initio SCF study', *Chemical Physics Letters*, **1990**, 173, 562-568.
14. F. Ramondo, L. Bencivenni, R. Caminiti, F. Grandinetti, 'Coordination structures and vibrational frequencies of Li and Na metaphosphates and nitrates. An ab initio SCF study', *Chemical Physics*, **1990**, 145, 27-35.
13. C. Cauletti, F. Grandinetti, G. Granozzi, M. Casarin, H. Werner, J. Wolf, A. Höhn, F.J. Garcia Alonso, 'Bonding in square-planar $\text{MCl}(\text{CX})[\text{P}(\text{i-Pr})_3]_2$ complexes of rhodium and iridium ($\text{X} = \text{O}$ and CH_2) studied by UV photoelectron spectroscopy and DV- X_α calculations', *Journal of Organometallic Chemistry*, **1990**, 382, 445-454.
12. F. Ramondo, L. Bencivenni, F. Grandinetti, 'Ab initio UHF-SCF calculations on LiF_2 and LiC_2 charge-transfer complexes', *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)*, **1990**, 206, 205-208.
11. G. Laguzzi, R. Bucci, F. Grandinetti, M. Speranza, 'Gas-phase heteroaromatic substitution. 8. Electrophilic attack of ethyl cation on pyrrole, N-methylpyrrole, furan, and thiophene', *The Journal of the American Chemical Society*, **1990**, 112, 3064-3068.
10. M. Attinà, F. Cacace, G. de Petris, F. Grandinetti, 'Gas phase protonation of alkyl and phenyl azides', *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes*, **1989**, 90, 263-279.
9. F. Bernardi, F. Cacace, F. Grandinetti, 'Relative stability of isomeric methyl nitrate cations $(\text{CH}_3\text{NO}_3)\text{H}^+$ ', *Journal of Chemical Society, Perkin Transactions II*, **1989**, 413-415.

8. F. Bernardi, F. Grandinetti, A. Guarino, M.A. Robb, 'Electronic structure of phenyl cation by MC-SCF *ab initio* calculations', *Chemical Physics Letters*, **1988**, *153*, 309-312.
7. F. Cacace, M.E. Crestoni, G. de Petris, S. Fornarini, F. Grandinetti, 'A comparative study of gas phase aromatic desilylation and deterbutylation by charged electrophiles', *Canadian Journal of Chemistry*, **1988**, *66*, 3099-3107.
6. C. Cauletti, F. Grandinetti, G. Granozzi, A. Sebald, B. Wrackmeyer, 'Sn-S and Sn-Se bonding in some tin (IV) compounds studied by UV photoelectron and NMR spectroscopy and pseudopotential *ab initio* calculations', *Organometallics*, **1988**, *7*, 262-266.
5. C. Cauletti, G. Cerichelli, F. Grandinetti, L. Luchetti, M. Speranza, 'Gas-phase basicity and ionization energies in some N-arylazacycloalkanes', *The Journal of Physical Chemistry*, **1988**, *92*, 2751-2753.
4. M. Bossa, C. Cauletti, F. Grandinetti, P. Nota, 'A quantum mechanical semiempirical interpretation of the electronic spectrum and the gas phase U.V. photoelectron spectrum of hemiporphyrzine', *Journal de Chimie Physique*, **1987**, *84*, 819-820.
3. C. Cauletti, C. Furlani, F. Grandinetti, D. Marton, 'Evidence for σ - π interaction in some allyltin compounds. UV photoelectron spectroscopy and LCBO calculations', *Journal of Organometallic Chemistry*, **1986**, *315*, 287-297.
2. C. Cauletti, F. Grandinetti, A. Sebald, B. Wrackmeyer, 'Gas-phase conformation of trimethylphenylthiostannane by UV photoelectron spectroscopy', *Inorganica Chimica Acta*, **1986**, *117*, L37-L38.
1. C. Cauletti, M.L. Di Vona, P. Gargano, F. Grandinetti, C. Galli, C. Lillocci, 'Ring-size effects on the ionization potentials of N-substituted azacycloalkanes', *Journal of Chemical Society, Perkin Transactions II*, **1986**, 667-670.

Elenco delle Attività Didattiche

Anno Accademico 1990/1991

Corso di “Radiochimica e Radiofarmaceutica”, integrativo dell’insegnamento ufficiale di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università “Gabriele D’Annunzio” di Chieti, Facoltà di Farmacia, Corso di Laurea in Farmacia

Anno Accademico 1991/1992

Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università “Gabriele D’Annunzio” di Chieti, Facoltà di Farmacia, Corso di Laurea in Farmacia

Anni Accademici 1992/1993, 1993/1994 e 1994/1995

Corso di “Laboratorio di Chimica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Biologiche

Anni Accademici 1995/1996 e 1996/1997

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Ambientali
2. Corso di “Laboratorio di Chimica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Biologiche

Anno Accademico 1997/1998

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Ambientali
2. Corso di “Laboratorio di Chimica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Biologiche
3. Corso di “Complementi di Chimica”, Università della Tuscia, Facoltà di Conservazione dei Beni Culturali, Corso di Laurea in Conservazione dei Beni Culturali

Anno Accademico 1998/1999

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Ambientali
2. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Diploma in Educatore e Divulgatore Ambientale
3. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Agraria, Corso di Laurea in Scienze Agrarie e Corso di Laurea in Scienze Forestali

Anno Accademico 1999/2000

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Ambientali
2. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Diploma in Educatore e Divulgatore Ambientale

Anni Accademici 2000/2001 e 2001/2002

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Ambientali
2. Corso di “Elementi di Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Educatore e Divulgatore Ambientale
3. Corso di “Laboratorio di Chimica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Biologiche

Anno Accademico 2002/2003

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Ambientali
2. Corso di “Elementi di Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Educatore e Divulgatore Ambientale
3. Corso di “Laboratorio di Chimica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Biologiche
4. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Conservazione dei Beni Culturali, Corso di Laurea interfacoltà in Tecnologie per la Conservazione e il Restauro dei Beni Culturali (Classe 41)

Anni Accademici 2003/2004 e 2004/2005

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Ambientali
2. Corso di “Elementi di Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Educatore e Divulgatore Ambientale
3. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Conservazione dei Beni Culturali, Corso di Laurea interfacoltà in Tecnologie per la Conservazione e il Restauro dei Beni Culturali (Classe 41)

Anno Accademico 2005/2006

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Ambientali
2. Corso di “Elementi di Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Educatore e Divulgatore Ambientale
3. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Biologiche
4. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Biotecnologie Agrarie ed Industriali

Anno Accademico 2006/2007

Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Ambientali.

Anni Accademici 2007/2008 e 2008/2009

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Biologiche
2. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Biotecnologie Agrarie ed Industriali

Anno Accademico 2010/2011

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea in Scienze Biologiche
2. Modulo di “Catalisi Chimica” del Corso di “Catalisi Chimica e Biocatalisi”, Università della Tuscia, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Corso di Laurea Magistrale in Biotecnologie Agrarie ed Industriali

Anno Accademico 2011/2012

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Dipartimento di Scienze Ecologiche e Biologiche (DEB), Corso di Laurea in Scienze Biologiche
2. Modulo di “Catalisi Chimica” del Corso di “Catalisi Chimica e Biocatalisi”, Università della Tuscia, Dipartimento di Scienze Ecologiche e Biologiche (DEB), Corso di Laurea Magistrale in Biotecnologie Agrarie ed Industriali

Anno Accademico 2012/2013

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Dipartimento di Scienze Ecologiche e Biologiche (DEB), Corso di Laurea in Scienze Biologiche (L-13)
2. Corso di Chimica Generale ed Inorganica per il Corso di Tirocinio Formativo Attivo (TFA), Università della Tuscia, per il conseguimento dell’abilitazione all’insegnamento nella scuola secondaria di II grado di Chimica e Tecnologie Chimiche (classe di abilitazione A013)

Anno Accademico 2013/2014

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Dipartimento per la Innovazione nei sistemi Biologici, Agroalimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Laurea in Biotecnologie (L-2)
2. Corso di Chimica Generale ed Inorganica per il Percorso Formativo Abilitante Speciale (PAS – TFA speciale), Università della Tuscia, per il conseguimento dell’abilitazione all’insegnamento nella scuola secondaria di II grado di Chimica e Tecnologie Chimiche (classe di abilitazione A013)
3. Modulo di Chimica Generale ed Inorganica, Istituto Centrale per il Restauro e la Conservazione del Patrimonio Archivistico e Librario, Corso di Laurea Magistrale in Conservazione e Restauro dei Beni Culturali (LM/2, PP5)

Anno Accademico 2014/2015

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Toscana, Dipartimento per la Innovazione nei sistemi Biologici, Agroalimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Laurea in Biotecnologie (L-2)
2. Corso di “Chimica Generale”, Università della Toscana, Dipartimento per la Innovazione nei sistemi Biologici, Agroalimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Laurea in Tecnologie Alimentari ed Enologiche (L-26)
3. Corso di “Chimica Inorganica e Mineralogica”, Università della Toscana, Dipartimento di Scienze dei Beni Culturali (DISBEC), Corso di Laurea in Conservazione e Restauro dei Beni Culturali (abilitante ai sensi del D.Lgs n. 42/2004) LMR/02

Anni Accademici 2015/2016, 2016/2017 e 2017/2018

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Toscana, Dipartimento per la Innovazione nei sistemi Biologici, Agroalimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Laurea in Biotecnologie (L-2)
2. Modulo di “Catalisi Chimica” (3 CFU) del Corso di “Catalisi ed enzimologia applicata alle biotecnologie”, Università della Toscana, Dipartimento per la Innovazione nei sistemi Biologici, Agroalimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Laurea Magistrale in Biotecnologie per l'Agricoltura, l'Ambiente e la Salute (LM-7).

Anno Accademico 2018/2019

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Toscana, Dipartimento per la Innovazione nei sistemi Biologici, Agroalimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Laurea in Biotecnologie
2. Modulo di “Principi di Catalisi” (3 CFU), Università della Toscana, Dipartimento per la Innovazione nei sistemi Biologici, Agroalimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Laurea Magistrale in Biotecnologie Industriali per la Salute e il Benessere (LM-8).

Anno Accademico 2019/2020

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Toscana, Dipartimento per la Innovazione nei sistemi Biologici, Agroalimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Laurea in Biotecnologie
2. Modulo di “Principi di Catalisi” (3 CFU), Università della Toscana, Dipartimento per la Innovazione nei sistemi Biologici, Agroalimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Laurea Magistrale in Biotecnologie Industriali per la Salute e il Benessere (LM-8)
3. Corso di “Elementi di Chimica”, Università della Toscana, Dipartimento per la Innovazione nei sistemi Biologici, Agroalimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Conservazione e Restauro dei Beni Culturali (abilitante ai sensi del D.Lgs n. 42/2004) LMR/02

Anni Accademici 2020/2021, 2021/2022, 2022/2023 e 2023/2024

1. Corso di “Chimica Generale ed Inorganica”, Università della Tuscia, Dipartimento per la Innovazione nei sistemi Biologici, Agroalimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Laurea in Biotecnologie
2. Modulo di “Principi di Catalisi” (3 CFU), Università della Tuscia, Dipartimento per la Innovazione nei sistemi Biologici, Agroalimentari e Forestali (DIBAF), Corso di Laurea Magistrale in Biotecnologie Industriali per la Salute e il Benessere (LM-8)