

# ANTONIO BUONERBA

## CURRICULUM VITAE ET STUDIORUM

*10 agosto 2020, Fisciano (SA), Italia*

### Indice dei contenuti

<b>1. INFORMAZIONI GENERALI.....</b>	<b>2</b>
1.1. INFORMAZIONI PERSONALI.....	2
1.2. BREVE INTRODUZIONE DEL CANDIDATO E DEI RISULTATI SCIENTIFICI OTTENUTI .....	3
<b>2. FORMAZIONE E ABILITAZIONI.....</b>	<b>9</b>
2.1. ISTRUZIONE SUPERIORE.....	9
2.2. ABILITAZIONI AL RUOLO DI DOCENTE UNIVERSITARIO .....	9
2.3. PARTECIPAZIONE A SCUOLE DI FORMAZIONE RISERVATE A DOTTORANDI .....	10
<b>3. RICERCA SCIENTIFICA .....</b>	<b>11</b>
3.1. ATTIVITÀ DI RICERCA SCIENTIFICA.....	11
3.2. ARTICOLI SCIENTIFICI (PUBBLICATI SU RIVISTE CON IMPACT FACTOR) .....	13
3.3. ARTICOLI SCIENTIFICI ATTUALMENTE PROPOSTI PER PUBBLICAZIONE .....	30
3.4. ARTICOLI SCIENTIFICI (PUBBLICATI IN RIVISTE CON ISSN OR ISBN).....	31
3.5. PARAMETRI BIBLIOMETRICI .....	32
<i>Tabella 1. Principali parametri bibliometrici .....</i>	32
<i>Figura 1. Numero di pubblicazioni e numero di citazioni in funzione dell'anno (aggiornato al 24-02-2020). ....</i>	32
<i>Tabella 2. Numero di citazioni di pubblicazioni su riviste con Impact Factor.....</i>	33
<i>Tabella 3. Impact Factor delle riviste scientifiche .....</i>	36
3.5. BREVETTI .....	37
3.6. STRUTTURE MOLECOLARI RISOLTE MEDIANTE DIFFRAZIONE DEI RAGGI-X, DEPOSITATE IN CAMBRIDGE CRYSTALLOGRAPHIC DATA CENTRE (CCDC).....	38
3.7. CAPITOLI IN LIBRO .....	39
3.8. CONTRIBUTI IN CONGRESSI SCIENTIFICI.....	40
3.9. PARTECIPAZIONE A PROGETTI DI RICERCA .....	46
3.10. COLLABORAZIONI SCIENTIFICHE ATTIVE .....	48
3.11. AFFILIAZIONE A SOCIETÀ SCIENTIFICHE.....	51
3.13. ATTIVITÀ DI REVISORE DI ARTICOLI SCIENTIFICI (PEER-REVIEWER) .....	51
<b>4. ATTIVITÀ DIDATTICA .....</b>	<b>52</b>
4.1. INCARICHI DI DIDATTICA CONFERITI DA ISTITUZIONI UNIVERSITARIE .....	52
4.2. NOMINE DI CULTORE DELLA MATERIA CONFERITE DA UNIVERSITÀ .....	54
4.3. PARTECIPAZIONE IN QUALITÀ DI DOCENTE A CONTRATTO A SEDUTE DI ESAMI UNIVERSITARI.....	54
4.4. INCARICHI DA PARTE DI UNIVERSITÀ DI PROGETTI “ALTERNANZA SCUOLA-LAVORO” .....	54
<b>5. AUTORIZZAZIONE AL TRATTAMENTO DEI DATI .....</b>	<b>55</b>

## **1. INFORMAZIONI GENERALI**

---

### **1.1. INFORMAZIONI PERSONALI**

*Nome e Cognome:* **Antonio Buonerba**

*Data di nascita:*

*Città di nascita*

*Nazionalità:*

*Carta d'identità:*

*Codice fiscale:*

*Domicilio:*

*Residenza:*

*Telefono:*

*Posta elettronica:* [abuonerba@yahoo.it](mailto:abuonerba@yahoo.it)

*Posta elettronica certificata:* [antonio.buonerba@pec.basilicatanet.it](mailto:antonio.buonerba@pec.basilicatanet.it)

*Profili scientifici pubblici:* Google Scholar: <https://scholar.google.it/citations?user=smJwWTYAAAJ&hl=it&oi=ao>

Scopus: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=36670901300>

ResearchGate: [https://www.researchgate.net/profile/Antonio\\_Buonerba](https://www.researchgate.net/profile/Antonio_Buonerba)

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1101-3248>

ResearcherID: <http://www.researcherid.com/rid/C-3112-2013>

UniSA: [https://www.iris.unisa.it/cris/rp/rp08564?sort\\_byall=2&orderall=DESC&open=all#all](https://www.iris.unisa.it/cris/rp/rp08564?sort_byall=2&orderall=DESC&open=all#all)



## **1.2. BREVE INTRODUZIONE DEL CANDIDATO E DEI RISULTATI SCIENTIFICI OTTENUTI**

Il dott. Antonio Buonerba ha ottenuto la Laurea in Chimica l'11 dicembre 2007 con voto di 108/110 presso l'Università degli Studi di Salerno, svolgendo una tesi sperimentale dal titolo “*Studio di Proprietà Meccaniche e Morfologiche di Blends e Copolimeri a Blocchi di 1,4-cis-Polibutadiene e Polistirene Sindiotattico*”, avendo come tutore il Prof. Alfonso Grassi. Durante questo periodo di formazione il dott. Buonerba ha acquisito le tecniche di sintesi di complessi organometallici e di polimerizzazione di olefine in atmosfera inerte (tecniche Schlenk), nonché le tecniche di caratterizzazione tensile e morfologica di materiali polimerici tramite microscopia a forza atomica (AFM). In questa fase, le attitudini scientifiche del dott. Buonerba hanno beneficiato profondamente della allora forte e consolidata competenza nel campo dei complessi metallorganici e dei materiali polimerici fornita dal Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Salerno.

Dopo aver svolto una breve borsa di studio (12/03/2008-30/10/2008) finanziata dalla Esmalglass s.p.a., il cui progetto riguardava la: “*Sintesi di materiali vetrosi inorganici e compositi inorganici-organici*”, il dott. Buonerba ha svolto il suo percorso di Dottorato di Ricerca in Chimica (01/11/2008-30/10/2011), sotto la guida del Prof. Alfonso Grassi presso il Dip. Di Chimica dell'Università di Salerno, con un progetto dal titolo: “*Materiali Ibridi e Nanostrutturati Derivati da Copolimeri Multiblocco Polistirene-Polibutadiene: Sintesi e Applicazioni*”, terminato con il conseguimento del titolo di Dottore di Ricerca l'11 gennaio 2012 con la massima valutazione di “*Ottimo*”. Questo percorso ha permesso al dott. Buonerba di apprendere dal punto di vista pratico e scientifico diverse tecniche spettroscopiche e spettrometriche (spettroscopia di risonanza magnetica nucleare NMR; spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier, FT-IR; spettroscopia nell'ultravioletto e visibile, UV-Vis; spettrometria di massa, MS; spettroscopia di assorbimento atomico AAS; spettrometria di emissione ottica di plasma accoppiato induttivamente, ICP-OES), cromatografiche (gas cromatografia, GC; cromatografia liquida ad alte prestazioni, HPLC, cromatografia di esclusione molecolare, SEC) e di caratterizzazione dei materiali (diffrazione dei raggi X, WAXD; calorimetria a scansione differenziale, DSC; termogravimetria, TGA; microscopie a trasmissione o scansione elettronica, TEM e SEM; analisi elementare, EA).

La sua attività di ricerca si è inizialmente concentrata sullo sviluppo di nuovi materiali polimerici,<sup>1-14</sup> di nuovi sistemi catalitici per la sintesi di materiali polimerici,<sup>2, 6-8, 10, 13-19</sup> di nuovi sistemi catalitici basati su nanoparticelle di oro stabilizzate da matrice polimerica nanoporosa<sup>20-23</sup> e di nuovi processi catalitici per la sintesi ecosostenibile di composti di chimica fine,<sup>18, 20-32</sup> in particolare nello sviluppo di sistemi catalitici a base di ferro per la reazione di accoppiamento di anidride carbonica con epossidi. Lo sviluppo di questi argomenti è stato portato avanti durante i progetti di Assegni di Ricerca che il dott. Buonerba ha svolto. Il primo progetto (1/8/2012-31/7/2015) ha avuto come argomento: “*Novel Catalytic Processes for the Ecosustainable Synthesis of Polymer Materials and Fine Chemicals*” ed il secondo (1/4/2016-31/3/2019) ha avuto come argomento: “*Novel Inorganic-Organic Hybrid Materials, Macromolecular Systems and*

*Metalorganic Complexes for Application in Catalysis, Material Science and Biomedicine*". Il dott. Buonerba ha sviluppato una nuova classe di catalizzatori a base di nanoparticelle metalliche in cui l'attività del metallo è regolata dalla matrice polimerica porosa.<sup>20-23</sup> Infatti, le nanocavità ed i nanocanali presenti nella matrice cristallina del polistirene sindiotattico assistono il processo catalitico, agendo da convogliatori e concentratori dei reagenti, determinando in maniera controllata attività e selettività chimica. La sintesi di questi sistemi è semplice e li rende facilmente utilizzabili per scopi sintetici di laboratorio e potenzialmente industriali. Svariati sono i potenziali impieghi sintetici in cui possono essere applicati. Il dott. Buonerba ne ha testato l'utilizzo in ossidazione aerobica di alcoli, dove il catalizzatore permette di discriminare la tipologia di alcol ossidabile.<sup>20, 21, 23</sup> Alcoli benzilici, allilici ed in genere "*benzylic-like*" vengono ossidati con facilità dal sistema, perché facilmente permeanti nella matrice polimerica aromatica, mentre gli alcoli alchilici non vengono ossidati. Ciò ha reso possibile la reazione di esterificazione diretta di alcoli, effettuando la reazione di accoppiamento di alcoli alchilici con benzilici ed allilici formando i corrispondenti carbossilati alchilici.<sup>21</sup> La modulabilità del sistema catalitico sviluppato dal candidato ha trovato applicazione nella ossidazione selettiva di un interessante substrato quale il 5-idrossimetilfurfurale (HMF).<sup>23</sup> Questo substrato, di origine da fonti rinnovabili, è attualmente considerato una molecola piattaforma per la sintesi di prodotti di chimica fine e polimeri. La complessa reattività di questa molecola rende difficile l'ossidazione controllata per l'ottenimento dei prodotti desiderati. Il sistema AuNPs-sPSB ha permesso di regolare finemente il processo di ossidazione aerobica dell'HMF, ottenendo a seconda delle condizioni di reazione adottate con elevate rese e selettività il derivato dialdeidico, il derivato monoaldeidico-monoacidico, il derivato diacidico e, tramite esterificazione diretta con metanolo, il derivato monoestere e diestere. Tale flessibilità sintetica non ha precedenti tra i sistemi in cui le nanoparticelle metalliche sono supportate da altre matrici sia inorganiche che organiche. Questo studio è stato condotto dal dott. Buonerba nell'ambito di un progetto di ricerca denominato Rebiochem (Biochemicals da biomassa: Integrazioni di bio-conversioni per la produzione e l'applicazione di biochemicals da biomasse da II generazione da fonti rinnovabili), dove una cordata di industrie multinazionali e istituzioni accademiche, tra le quali l'Università degli Studi di Salerno, concorrono allo sviluppo di processi per l'ottenimento di composti chimici di interesse da fonti rinnovabili (per maggiori dettagli si veda la scheda nel paragrafo: 4.9. Partecipazione a Progetti di Ricerca). Per il progetto Rebiochem il dott. Buonerba ha inoltre sviluppato nuovi materiali polimerici costituiti da copolimeri casuali dello stirene e del 2-vinilfurano, dove la funzionalità furanica ha offerto la possibilità di effettuare una reticolazione reversibile. Questa caratteristica ha permesso di ottenere materiali polimerici con proprietà di auto-riparazione di crepe e fratture sotto stimolo termico.<sup>9, 11</sup>

Il dott. Buonerba ha inoltre sviluppato diversi nuovi sistemi catalitici omogenei basati su complessi metallici. Utilizzando un metallo largamente disponibile e di basso costo quale il ferro e, utilizzando dei nuovi leganti ditioetere-trifenolato, ha introdotto una nuova classe di catalizzatori per la reazione di

cicloaddizione dell'anidride carbonica ad epossidi per l'ottenimento di carbonati ciclici organici.<sup>18, 24-30</sup> Questi composti, grazie alla loro inerzia chimica, l'elevata polarità ed alta temperatura di ebollizione, trovano applicazione come solventi industriali ed in batterie al litio. Successivamente, utilizzando complessi di ferro recanti leganti ditioetere-bisfenolato, leganti denominati "OSO", il dott. Buonerba ha sviluppato sistemi catalitici che si sono riscontrati tra i più attivi tra quelli riportati finora in condizioni di reazione blande, ossia pressione atmosferica dell'anidride carbonica e temperatura ambiente, combinati ad un basso utilizzo di quantità di catalizzatore. I sistemi OSSO-Fe hanno mostrato la selettiva la formazione di polimeri altamente alternati utilizzando, in presenza di anidride carbonica a bassa pressione, il cicloesene ossido. Un approfondito studio sperimentale cinetico e computazionale DFT è stato svolto per determinare il meccanismo di coordinazione attivante l'epossido e l'anidride carbonica su questi centri metallici. A seconda del substrato adottato può intervenire un meccanismo bimetallico o monometallico, determinante la formazione di carbonati ciclici organici o polimerici.<sup>18</sup>

Svariati sono stati i sistemi catalitici metallici che il dott. Buonerba ha contribuito a sviluppare nell'ambito della polimerizzazione di olefine, quali etilene, propilene,<sup>7, 8, 13, 15, 19</sup> e dieni rinnovabili,<sup>10</sup> nonché di lattoni<sup>6, 14, 16, 17</sup> derivabili da fonti rinnovabili quali il *rac*-lattide, l' $\epsilon$ -caprolattone ed il butirrolattone. Di particolare menzione è degna, in quest'ultimo ambito, lo sviluppo di un complesso dinucleare di zirconio recante un legante macrociclico di tipo calixarenico.<sup>14</sup> Il legante, che reca un ponte para-xilenico, costringe i due centri metallici a localizzarsi sullo stesso lato dell'anello macrociclico. In questo modo i due metalli sono in grado di cooperare coordinando la catena polimerica poliestere in crescita, così effettuando un processo di transesterificazione che porta alla formazione selettiva di oligomeri ciclici con una stretta distribuzione del numero di unità lattidiche inserite. Questo tipo di transesterificazione assistita dalla coordinazione a due centri metallici della catena polimerica in crescita non ha precedenti di letteratura, quindi apre una nuova ed esclusiva modalità di ottenimento di polimeri ciclici. Questi materiali hanno interessanti, ed ancora non del tutto esplorate, proprietà meccaniche-reologiche e possono trovare impiego come agenti chelanti biocompatibili.

Un recente studio, degno di nota da parte del dott. Buonerba, riguarda l'utilizzo di nanoparticelle d'oro stabilizzate dal peptide glutatione per applicazione in ambito biomedico. Questo studio non è ancora stato pubblicato ed è stato presentato dal dott. Buonerba, con una comunicazione orale, nel Simposio "I Chimici Per Le Biotecnologie" svoltosi a Napoli (13-14 febbraio 2020) ed organizzato dal Gruppo Interdivisionale di Biotecnologie della Società Chimica Italiana. L'aggregazione delle particelle di oro, indotta dalla coordinazione al peptide di cloruro di sodio, aiuta l'internalizzazione delle particelle in cellule epatocitarie tumorali e neuronali fino a penetrare il nucleo cellulare inducendo, sorprendentemente, una risposta fototermica eccezionale su sollecitazione laser a bassa potenza nella radiazione infrarossa in grado di causare la completa mortalità cellulare.

Il dott. Antonio Buonerba attualmente è titolare di un Incarico di Collaborazione con il Consorzio inter-Universitario per la previsione e la prevenzione dei Grandi Rischi (C.U.G.RI.) per un progetto dal titolo: “*Supporto alle attività di messa a punto di nuove metodiche analitiche per la determinazione di contaminanti in matrice liquida, solida e gassosa*”. L’attività è svolta presso il Laboratorio di Ingegneria Sanitaria e Ambientale (Sanitary Environmental Engineering Division, SEED) del Dip. di Ingegneria Civile dell’Università di Salerno sotto supervisione del Prof. Ing. Vincenzo Belgiorno, Responsabile Scientifico del progetto e del Prof. Vincenzo Naddeo, responsabile del Laboratorio. Per lo sviluppo di nuove metodiche analitiche, il dott. Buonerba si avvale di due gascromatografi (GC-MS, GC-TCD/FID), di un cromatografo a scambio ionico (IEC), di un analizzatore del contenuto di carbonio (TC, TIC, TOC, DOC), di un analizzatore elementare e di uno spettrometro a emissione ottica di plasma accoppiato induttivamente (ICP-OES). Il dott. Buonerba si occupa inoltre dello sviluppo di nuovi sistemi avanzati ed ecosostenibili per la purificazione delle acque reflue tramite membrane dinamiche biologiche autoformanti (self-forming dynamic membranes, SFDM).

Il dott. Buonerba a pubblicato più di 37 articoli scientifici di cui 35 su riviste internazionali indicizzate nei database Scopus e Web of Science di elevato impatto scientifico. Ha inoltre depositato due brevetti<sup>33, 34</sup> a nome dell’Università degli Studi di Salerno, riguardante la sintesi di mescole polimeriche per applicazione nell’industria degli pneumatici e di materiali polimerici solfonati per applicazione come ionomeri, ed è autore di due capitoli<sup>35, 36</sup> in libro. Attualmente ha un H-index di 15 corrispondente ad oltre 680 citazioni (<https://scholar.google.it/citations?user=smJwWTYAAAAJ&hl=it&authuser=1>).

Il percorso accademico del dott. Buonerba lo ha condotto al conseguimento dell’Abilitazione Scientifica Nazionale (ASN) per il ruolo di Professore di Seconda Fascia in tre Settori Scientifici Disciplinari (SSD): *i)* CHIM/06 - Chimica Organica (valida dal 23/05/2019 al 23/05/2028); *ii)* CHIM/07 - Fondamenti Chimici delle Tecnologie (valida dal 25/10/2018 al 25/10/2027); *iii)* CHIM/03 - Chimica generale ed inorganica (valida dal 07/08/2018 al 07/08/2027).

1. Buonerba, A.; Cuomo, C.; Speranza, V.; Grassi, A., Crystalline Syndiotactic Polystyrene as Reinforcing Agent of cis-1,4-Polybutadiene Rubber. *Macromolecules* **2010**, *43* (1), 367-374.
2. Buonerba, A.; Fienga, M.; Milione, S.; Cuomo, C.; Grassi, A.; Proto, A.; Capacchione, C., Binary Copolymerization of p-Methylstyrene with Butadiene and Isoprene Catalyzed by Titanium Compounds Showing Different Stereoselectivity. *Macromolecules* **2013**, *46* (21), 8449-8457.
3. Buonerba, A.; Speranza, V.; Grassi, A., Novel Synthetic Strategy for the Sulfonation of Polybutadiene and Styrene–Butadiene Copolymers. *Macromolecules* **2013**, *46* (3), 778-784.
4. Capacchione, C.; De Roma, A.; Buonerba, A.; Speranza, V.; Milione, S.; Grassi, A., Syndiotactic Polystyrene-block-Poly(methyl methacrylate) Copolymer via Click Chemistry. *Macromol. Chem. Phys.* **2013**, *214* (17), 1990-1997.
5. Buonerba, A.; Speranza, V.; Canton, P.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A., Novel nanostructured semicrystalline ionomers by chemoselective sulfonation of multiblock copolymers of syndiotactic polystyrene with polybutadiene. *RSC Adv.* **2014**, *4* (104), 60158-60167.

6. Della Monica, F.; Luciano, E.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C., Poly(lactide-co- $\epsilon$ -caprolactone) copolymers prepared using bis-thioetherphenolate group 4 metal complexes: synthesis, characterization and morphology. *RSC Adv.* **2014**, *4* (93), 51262-51267.
7. Galdi, N.; Buonerba, A.; Oliva, P.; Oliva, L., Nanostructured ethylene-styrene copolymers. *Polym. Chem.* **2014**, *5* (8), 3045-3052.
8. Galdi, N.; Buonerba, A.; Oliva, L., Olefin-Styrene Copolymers. *Polymers* **2016**, *8* (11), 405.
9. Buonerba, A.; Lapenta, R.; Ortega Sánchez, S.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A., A Comprehensive Depiction of the Furan-Maleimide Coupling via Kinetic and Thermodynamic Investigations of the Diels-Alder Reaction of Poly(styrene-co-2-vinylfuran) with Maleimides. *ChemistrySelect* **2017**, *2* (4), 1605-1612.
10. Naddeo, M.; Buonerba, A.; Luciano, E.; Grassi, A.; Proto, A.; Capacchione, C., Stereoselective polymerization of biosourced terpenes  $\beta$ -myrcene and  $\beta$ -ocimene and their copolymerization with styrene promoted by titanium catalysts. *Polymer* **2017**, *131* (Supplement C), 151-159.
11. Buonerba, A.; Speranza, V.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A., Improvement of tensile properties, self-healing and recycle of thermoset styrene/2-vinylfuran copolymers via thermal triggered rearrangement of covalent crosslink. *Eur. Polym. J.* **2018**, *99*, 368-377.
12. Buonerba, A.; Della Monica, F.; Speranza, V.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A., Thin Film Nanostructure and Polymer Architecture in Semicrystalline Syndiotactic Poly(p-methylstyrene)-cis-1,4-Polybutadiene Multiblock Copolymers. *Polym. Int.* **2019**, *0* (ja).
13. Lamparelli, D. H.; Speranza, V.; Camurati, I.; Buonerba, A.; Oliva, L., Synthesis and Characterization of Syndiotactic Polystyrene-Polyethylene Block Copolymer. *Polymers* **2019**, *11* (4), 698.
14. Lapenta, R.; De Simone, N. A.; Buonerba, A.; Talotta, C.; Gaeta, C.; Neri, P.; Grassi, A.; Milione, S., Dinuclear zirconium complex bearing a 1,5-bridged-calix[8]arene ligand as an effective catalyst for the synthesis of macrolactones. *Catal. Sci. Technol.* **2018**, *8* (10), 2716-2727.
15. Luciano, E.; Della Monica, F.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Milione, S., Polymerization of ethylene and propylene promoted by group 4 metal complexes bearing thioetherphenolate ligands. *Polym. Chem.* **2015**, *6* (25), 4657-4668.
16. Luciano, E.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C., Thioetherphenolate group 4 metal complexes in the ring opening polymerization of rac- $\beta$ -Butyrolactone. *J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem.* **2016**, *54* (19), 3132-3139.
17. Lapenta, R.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C., Stereorigid OSSO-Type Group 4 Metal Complexes in the Ring-Opening Polymerization of rac-Lactide. *Inorg. Chem.* **2017**, *56* (6), 3447-3458.
18. Della Monica, F.; Maity, B.; Pehl, T.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Grassi, A.; Rieger, B.; Cavallo, L.; Capacchione, C., [OSMO]-Type Iron(III) Complexes for the Low-Pressure Reaction of Carbon Dioxide with Epoxides: Catalytic Activity, Reaction Kinetics, and Computational Study. *ACS Catal.* **2018**, *8*, 6882-6893.
19. Lapenta, R.; Buonerba, A.; Luciano, E.; Della Monica, F.; De Nisi, A.; Monari, M.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Milione, S., Phenylene-Bridged OSSO-Type Titanium Complexes in the Polymerization of Ethylene and Propylene. *ACS Omega* **2018**, *3* (9), 11608-11616.
20. Buonerba, A.; Cuomo, C.; Ortega Sánchez, S.; Canton, P.; Grassi, A., Gold Nanoparticles Incarcerated in Nanoporous Syndiotactic Polystyrene Matrices as New and Efficient Catalysts for Alcohol Oxidations. *Chem. Eur. J.* **2012**, *18* (2), 709-715.
21. Buonerba, A.; Noschese, A.; Grassi, A., Highly Efficient Direct Aerobic Oxidative Esterification of Cinnamyl Alcohol with Alkyl Alcohols Catalysed by Gold Nanoparticles Incarcerated in a Nanoporous Polymer Matrix: A Tool for Investigating the Role of the Polymer Host. *Chem. Eur. J.* **2014**, *20* (18), 5478-5486.
22. Noschese, A.; Buonerba, A.; Canton, P.; Milione, S.; Capacchione, C.; Grassi, A., Highly efficient and selective reduction of nitroarenes into anilines catalyzed by gold nanoparticles incarcerated in a nanoporous polymer matrix: Role of the polymeric support and insight into the reaction mechanism. *J. Catal.* **2016**, *340*, 30-40.

23. Buonerba, A.; Impemba, S.; Litta, A. D.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A., Aerobic Oxidation and Oxidative Esterification of 5-Hydroxymethylfurfural by Gold Nanoparticles Supported on Nanoporous Polymer Host Matrix. *ChemSusChem* **2018**, *11* (18), 3139-3149.
24. Buonerba, A.; De Nisi, A.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C.; Vagin, S.; Rieger, B., Novel iron(III) catalyst for the efficient and selective coupling of carbon dioxide and epoxides to form cyclic carbonates. *Catal. Sci. Technol.* **2015**, *5* (1), 118-123.
25. Buonerba, A.; Della Monica, F.; De Nisi, A.; Luciano, E.; Milione, S.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Rieger, B., Thioether-triphenolate bimetallic iron(III) complexes as robust and highly efficient catalysts for cycloaddition of carbon dioxide to epoxides. *Faraday Discuss.* **2015**, *183* (0), 83-95.
26. Della Monica, F.; Vummaleti, S. V. C.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Milione, S.; Grassi, A.; Cavallo, L.; Capacchione, C., Coupling of Carbon Dioxide with Epoxides Efficiently Catalyzed by Thioether-Triphenolate Bimetallic Iron(III) Complexes: Catalyst Structure-Reactivity Relationship and Mechanistic DFT Study. *Adv. Synth. Catal.* **2016**, *358* (20), 3231-3243.
27. Della Monica, F.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Milione, S., Glycidol: an Hydroxyl-Containing Epoxide Playing the Double Role of Substrate and Catalyst for CO<sub>2</sub> Cycloaddition Reactions. *ChemSusChem* **2016**, *9* (24), 3457-3464.
28. Della Monica, F.; Leone, M.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C., CO<sub>2</sub> cycloaddition to epoxides promoted by bis-thioether-phenolate Fe(II) and Fe(III) complexes. *Mol. Catal.* **2018**, *460*, 46-52.
29. Della Monica, F.; Buonerba, A.; Capacchione, C., Homogeneous Iron Catalysts in the Reaction of Epoxides with Carbon Dioxide. *Adv. Synth. Catal.* **2019**, *361* (2), 265-282.
30. Della Monica, F.; Buonerba, A.; Paradiso, V.; Milione, S.; Grassi, A.; Capacchione, C., [OSO]-Type Fe(III) Metallate as Single-Component Catalyst for the CO<sub>2</sub> Cycloaddition to Epoxides. *Adv. Synth. Catal.* **2019**, *361* (2), 283-288.
31. La Manna, P.; Soriente, A.; De Rosa, M.; Buonerba, A.; Talotta, C.; Gaeta, C.; Neri, P., Green, Mild, and Efficient Friedel-Crafts Benzylation of Scarcely Reactive Arenes and Heteroarenes under On-Water Conditions. *ChemSusChem* **2019**, *12* (8), 1673-1683.
32. Vitiello, R.; Buonerba, A.; Tesser, R.; Di Serio, M.; Grassi, A.; Santacesaria, E. In *Use of waste materials for biodiesel production*, DGMK Tagungsbericht, 2012; pp 49-54.
33. Buonerba, A.; Grassi, A. Sintesi di Polialchilosolfonati da Destinare alla Produzione di Ionomeri e Polielettroliti Mediante Solfonazione Selettiva di Polidieni e Copolimeri dei Dieni Coniugati (Synthesis of Polyalkylsulphonates for Production of Ionomers and Polyelectrolytes by Selective Sulfonation of Polydienes and Copolymers of Conjugated Dienes). SA2012A000007, 2012.
34. Grassi, A.; Cuomo, C.; Buonerba, A. Mescole di cis-1,4-Polibutadiene Rinforzate con Micro e Nanoparticelle di Polistirene Sindiotattico Cristallino Prodotte Mediante un Singolo Processo Catalitico a Stadi (Blends of cis-1,4-Polybutadiene Reinforced with Micro and Nanoparticles of Crystalline Syndiotactic Polystyrene Produced by a Single Catalytic Process In Stages). SA2009A000013, 2009.
35. Grassi, A.; Buonerba, A.; Ortega Sánchez, S., Bio-sourced polyolefins. In *Biorefineries, An Introduction*, Aresta, M.; Dibenedetto, A.; Dumeignil, F., Eds. De Gruyter: 2015; pp 165-196.
36. Bisceglia, B.; Buonerba, A.; Fondacaro, A.; Grassi, A.; Guerriero, L., Trattamento a microonde di beni architettonici. Verifiche strutturali su campioni di tufo. (Microwave Treatment of Architectural Heritage. Structural Tests on Tuff Stones). In *Tecnologie Innovative per il Trattamento di Beni Culturali - Applicazioni delle Onde Elettromagnetiche per Diagnosi e Conservazione. (Innovative technologies for treatment of the Cultural Heritage - Applications of Electromagnetic waves for Diagnosis and Conservation)*, Bisceglia, B., Ed. Aracne Editrice: 2016; pp 307-326.

## **2. FORMAZIONE E ABILITAZIONI**

---

### **2.1. ISTRUZIONE SUPERIORE**

11.12.2007 **Laurea in Chimica, indirizzo in Chimica Inorganica**

*Voto:* 108/110.

*Sede:* Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università degli Studi di Salerno.

*Tesi sperimentale:* “Studio di Proprietà Meccaniche e Morfologiche di Blends e Copolimeri a Blocchi di 1,4-cis-Polibutadiene e Polistirene Sindiotattico”.

*Tutore:* Prof. Alfonso Grassi.

11.01.2012 **Dottorato di Ricerca in Chimica**

*Menzione:* Ottimo

*Sede:* Dipartimento di Chimica e Biologia dell'Università degli Studi di Salerno.

*Tesi sperimentale:* “*Materiali Ibridi e Nanostrutturati Derivati da Copolimeri Multiblocco Polistirene-Polibutadiene: Sintesi e Applicazioni*”.

*Tutore:* Prof. Alfonso Grassi.

*URL:* <http://elea.unisa.it/handle/10556/275>

31.07.2019 **Master Annuale di I Livello e Perfezionamento in Materie Antropo-Psico-Pedagogiche E Nelle Metodologie E Tecnologie Didattiche**

*Argomento Master:* “La Didattica, la funzione del docente e l'inclusione scolastica degli alunni con bisogni educativi speciali (BES)”.

*Titolo Tesi Master:* “Tutela del diritto allo studio per gli alunni con DSA attraverso il computer come strumento compensativo”

In concomitanza allo svolgimento del Master (1500 ore) sono stati conseguiti 60 CFU in materie antropo-psico-pedagogiche e metodologie e tecnologie didattiche nei seguenti insegnamenti: *i)* Pedagogia generale e sociale (M-PED/01); *ii)* Pedagogia (M-PED/02); *iii)* Metodologie e tecnologie didattiche (M-PED/03); *iv)* Pedagogia della scuola (M-PED/03); *v)* Tecnologie didattiche ed educative (M-PED/04); *vi)* Antropologia (M-DEA/01); *vii)* Psicologia (M-PSI/01); *viii)* Psicologia scolastica (M-PSI/04)].

### **2.2. ABILITAZIONI AL RUOLO DI DOCENTE UNIVERSITARIO**

23.05.2019 **Abilitazione Scientifica Nazionale al ruolo di Professore Universitario di Chimica**

23.05.2028 **Organica (II fascia)**

*Settore Concorsuale:* 03/C1 – Chimica Organica;

*Settore Scientifico Disciplinare:* CHIM/06 - Chimica Organica.

*URL:* <https://asn18.cineca.it/pubblico/miur/esito/03%252FC1/2/1>

07.08.2018 **Abilitazione Scientifica Nazionale al ruolo di Professore Universitario di Chimica**

07.08.2027 **Generale (II fascia)**

*Settore Concorsuale:* 03/B1 - Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici;

*Settore Scientifico Disciplinare:* CHIM/03 - Chimica Generale ed Inorganica.

*URL:* <https://asn16.cineca.it/pubblico/miur/esito-abilitato/03%252FB1/2/5>

25.10.2018 **Abilitazione Scientifica Nazionale al ruolo di Professore Universitario di Fondamenti Chimici delle Tecnologie (II fascia)**

*Settore Concorsuale:* 03/B2 - Fondamenti Chimici delle Tecnologie;

*Settore Scientifico Disciplinare:* CHIM/07 - Fondamenti Chimici delle Tecnologie.

*URL:* <https://asn16.cineca.it/pubblico/miur/esito-abilitato/03%252FB2/2/5>

## **2.3. PARTECIPAZIONE A SCUOLE DI FORMAZIONE RISERVATE A DOTTORANDI.**

2.09.2012- **International School on Polymer Synthesis and Characterization 2012 (ISOPSC-2012)**

*Argomento:* “*School on New and Old Polymers for Sustainable Chemistry*”.

*Ente organizzatore:* Dipartimento di Chimica e Biologia dell’Università degli Studi di Salerno.

*URL:* <http://www.isopsc2012.unisa.it/>

27.06.2010- **International School on Polymer Synthesis and Characterization 2010 (ISOPSC-2010)**

*Argomento:* “*Metal Catalyzed Olefin Polymerization: From the Metal Catalyst to the Macromolecular Architecture and Polymer Assembly*”.

*Ente organizzatore:* Department of Chemistry and Biology, University of Salerno, Fisciano, Italy.

*URL:* <http://www.isopsc2010.unisa.it/>

21.09.2009- **XV National School of Materials Science**

30.09.2009 Argomento: “*Convergent Technologies in Science: Challenges Associated to Functional Materials, Energetics and Human Health*”

*Ente organizzatore:* Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienza e Tecnologia dei Materiali (INSTM) and Università di Padova, Bressanone (BZ), Italy.

*URL:* [http://www.instm.it/test\\_new\\_version/index.php?targetpage=include-scuole-corsi\\_2009.php](http://www.instm.it/test_new_version/index.php?targetpage=include-scuole-corsi_2009.php)

### **3. RICERCA SCIENTIFICA**

---

#### **3.1. ATTIVITÀ DI RICERCA SCIENTIFICA**

- 2020.03.20– **Partecipazione all'Unita di Crisi Regionale della Campania – Emergenza epidemiologica da COVID-19**  
*Progetto di ricerca:* “Test dispositivi respiratori per il contrasto all'emergenza COVID-19”.  
*Istituzione:* Consorzio inter-Universitario per la previsione e la prevenzione dei Grandi Rischi (C.U.G.RI.).  
*Sede:* Laboratorio di Ingegneria Sanitaria (Sanitary Environmental Engineering Division, SEED), Dipartimento di Ingegneria Civile, Università degli Studi di Salerno, Fisciano (SA), Italy.  
*Responsabile Scientifico:* Prof. Vincenzo Belgiorno.
- 2020.06.10–2020.12.09 **Incarico di Collaborazione**  
*Progetto di ricerca:* “Supporto alle attività di messa a punto di nuove metodiche analitiche per la determinazione di contaminanti in matrice liquida, solida e gassosa”.  
*Istituzione:* Consorzio inter-Universitario per la previsione e la prevenzione dei Grandi Rischi (C.U.G.RI.).  
*Sede:* Laboratorio di Ingegneria Sanitaria (Sanitary Environmental Engineering Division, SEED), Dipartimento di Ingegneria Civile, Università degli Studi di Salerno, Fisciano (SA), Italy.  
*Responsabile Scientifico:* Prof. Vincenzo Belgiorno.
- 2019.09.11–2020.03.10 **Incarico di Collaborazione**  
*Progetto di ricerca:* “Supporto alle attività di messa a punto di nuove metodiche analitiche per la determinazione di contaminanti in matrice liquida, solida e gassosa”.  
*Ente finanziante:* Consorzio inter-Universitario per la previsione e la prevenzione dei Grandi Rischi (C.U.G.RI.).  
*Sede:* Laboratorio di Ingegneria Sanitaria (Sanitary Environmental Engineering Division, SEED), Dipartimento di Ingegneria Civile, Università degli Studi di Salerno, Fisciano (SA), Italy.  
*Responsabile Scientifico:* Prof. Vincenzo Belgiorno.
- 2016.04.01–2019.03.31. **Assegnista di Ricerca** (Legge 30 dic.2010, n. 240, art. 22, comma 4, lettera a.)  
*Area:* 03 - Scienze Chimiche.  
*Settore Scientifico Disciplinare:* CHIM/03 - Chimica Generale ed Inorganica.

## **Antonio Buonerba, Ph.D.**

*Progetto di ricerca:* “Novel Inorganic-Organic Hybrid Materials, Macromolecular Systems and Metalorganic Complexes for Application in Catalysis, Material Science and Biomedicine”.

*Sede:* Dipartimento di Chimica e Biologia “Adolfo Zambelli”, Università degli Studi di Salerno, Fisciano (SA), Italy.

*Responsabile Scientifico:* Prof. Alfonso Grassi.

2012.08.01–2015.07.31. **Assegnista di Ricerca** (Legge 30 dic.2010, n. 240, art. 22, comma 4, lettera a.)

*Area:* 03 - Scienze Chimiche.

*Settore Scientifico Disciplinare:* CHIM/03 - Chimica Generale ed Inorganica.

*Progetto di ricerca:* “Novel Catalytic Processes for the Ecosustainable Synthesis of Polymer Materials and Fine Chemicals”.

*Sede:* Dipartimento di Chimica e Biologia “Adolfo Zambelli”, Università degli Studi di Salerno, Fisciano (SA), Italy.

*Responsabile Scientifico:* Prof. Alfonso Grassi.

2012.03.12–2012.06.11. **Incarico di collaborazione coordinata e continuativa.**

*Progetto di ricerca:* “Controlled Synthesis of Gold Nanoparticles – Synthesis of Hybrid Materials – Catalytic Applications of Gold Nanoparticles”.

*Sede:* Dipartimento di Chimica e Biologia dell’Università degli Studi di Salerno.

*Responsabile Scientifico:* Prof. Alfonso Grassi.

2008.11.01–2012.01.11. **Dottorato di Ricerca.**

*Progetto di ricerca:* “Nanostructured Hybrid Materials from Multiblock Copolymers Polystyrene-Polybutadiene: Synthesis and Applications”.

*Sede:* Dipartimento di Chimica e Biologia “Adolfo Zambelli”, Università degli Studi di Salerno, Fisciano (SA), Italy.

*Tutore:* Prof. Alfonso Grassi.

2008.03.12–2008.10.30. **Borsa di Studio Post-Laurea.**

*Progetto di ricerca:* “Synthesis of Vitreous Inorganic Materials and Inorganic-Organic Composites”.

*Ente finanziante:* Esmalglass s.p.a.

### **3.2. ARTICOLI SCIENTIFICI (PUBBLICATI SU RIVISTE CON IMPACT FACTOR)**

#### **A35 Review: Viruses in wastewater: occurrence, abundance and detection methods**

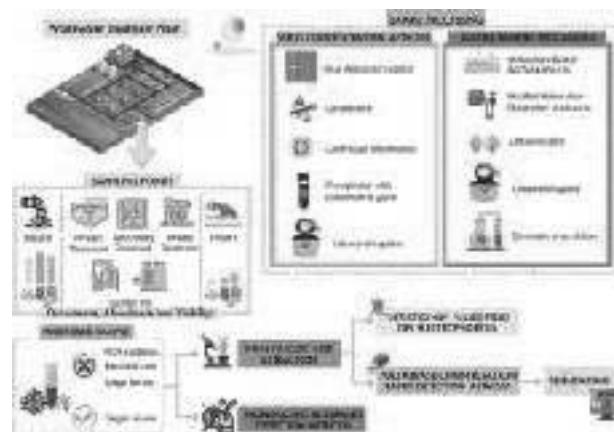
Mary Vermi Aizza Corpuz, Antonio Buonerba, Giovanni Vigliotta, Tiziano Zarra, Florencio Ballesteros Jr, Pietro Campiglia, Vincenzo Belgiorno, Gregory Korshing, Vincenzo Naddeo\*

*Science of The Total Environment. 2020, 745, 140910.*

DOI: 10.1016/j.scitotenv.2020.140910

URL: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.140910>

**Abstract:** This paper presents an updated and comprehensive review on the different methods used for detection and quantification of viruses in wastewater treatment systems. The analysis of viability of viruses in wastewater and sludge is another thrust of this review. Recent studies have mostly focused on determining the abundance and diversity of viruses in wastewater influents, in samples from primary, secondary, and tertiary treatment stages, and in final effluents. A few studies have also examined the occurrence and diversity of viruses in raw and digested sludge samples. Recent efforts to improve efficiency of virus detection and quantification methods in the complex wastewater and sludge matrices are highlighted in this review. A summary and a detailed comparison of the pre-treatment methods that have been utilized for wastewater and sludge samples are also presented. The role of metagenomics or sequencing analysis in monitoring wastewater systems to predict disease outbreaks, to conduct public health surveillance, to assess the efficiency of existing treatment systems in virus removal, and to re-evaluate current regulations regarding pathogenic viruses in wastewater is discussed in this paper. Challenges and future perspectives in the detection of viruses, including emerging and newly emerged viruses such as the Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2 (SARS-CoV-2), in wastewater systems are discussed in this review.



#### **A34 Article: NIR multiphoton ablation of cancer cells, fluorescence quenching and cellular uptake of dansyl-glutathione-coated gold nanoparticles**

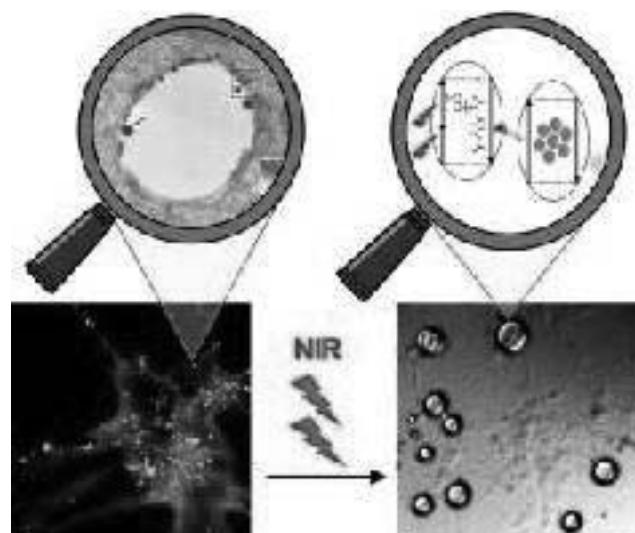
Antonio Buonerba\*, Rosita Lapenta, Anna Donniacuo, Magda Licasale, Elena Vezzoli, Stefano Milione, Carmine Capacchione, Mario Felice Tecce, Andrea Falqui\*, Roberto Piacentini\*, Claudio Grassi, Alfonso Grassi

*Scientific Reports 2020, 10, (1), 11380.*

DOI: 10.1038/s41598-020-68397-1

URL: <https://www.nature.com/articles/s41598-020-68397-1>

**Abstract:** Theranostics based on two-photon excitation of therapeutics in the NIR region is an emerging and powerful tool in cancer therapy since this radiation deeply penetrates healthy biological tissues and produces selective cell death. Aggregates of gold nanoparticles coated with glutathione corona functionalized with the dansyl chromophore (a-DG-AuNPs) were synthesized and found efficient nanodevice for applications in photothermal therapy (PTT). Actually the nanoparticle aggregation enhances the quenching of radiative excitation and the consequent conversion into heat. The a-DG-AuNPs are readily internalized in Hep G2 where the chromophore acts as both antenna and transducer of the NIR radiation under two-photon excitation, determining efficient cell ablation via photothermal effect.



**A33 Article: Efficient and Sustainable Treatment of Tannery Wastewater by a Sequential Electrocoagulation-UV Photolytic Process**

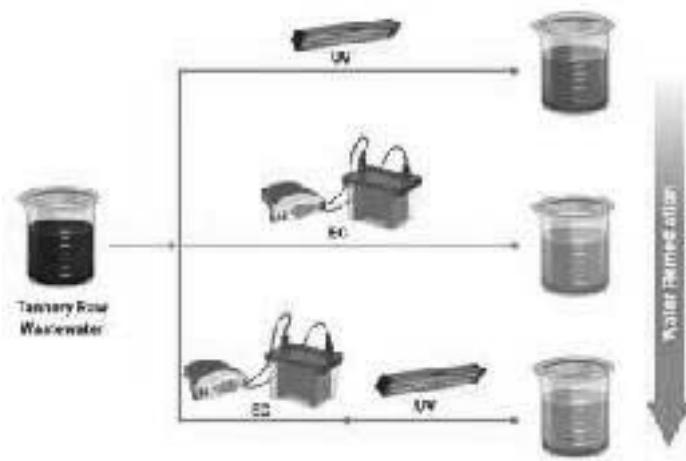
Jallouli Sameh\*, Ahmed Wali, Antonio Buonerba, Tiziano Zarra, Vincenzo Belgiorno, Vincenzo Naddeo\* and Mohamed Ksibi

*Journal of Water Process Engineering 2020, in press.*

DOI:

URL:

**Abstract:** Tannery wastewater contains plentiful quantities of suspended solids, organic matter and toxic chemical substances, which if directly discharged into ecosystems, such as rivers and seas, can generate a threat both to human health and environment. The present investigation focused the attention to physico-chemical properties of wastewater originate from tanned leather in Moknine, Tunisia. The analyses revealed wastewater with high levels of chemical oxygen demand (COD = 7375.68 mgO<sub>2</sub>/L), high chloride (Cl<sup>-</sup> = 1573 mg/L), high sulphide (S<sup>2-</sup> = 204 mg/L). The performance in reduction of COD via electrocoagulation (EC) using aluminium plate electrodes or UV photolysis or operating electrocoagulation and photolysis in sequence (EC-UV) was examined to determine the capability of treatment in reducing the strength of the wastewater. The effect of voltage and reaction time on COD reduction and the phytotoxicity using *Hordeum Vulgare* seeds were determined. The optimal reduction efficiency of COD was obtained by using an applied voltage of 5V. EC-UV process allowed achieving a decrease in COD up to 94.1%. Treated effluents were analysed by UV spectroscopy, extracting organic components with solvents differing in polarity (butanol and ethyl acetate). Spectra show two major absorption bands at wavelength of 275 and 255 nm in both the extracts. The absorption band at 275 nm in ethyl acetate extract decreased progressively as function the electrolysis time, the second band in butanol extract persisted in intensity. EC-UV process afforded significant reduction in COD. Both those technologies are yet available for scale-up application.



**A32 Article: Amino-functionalized mesoporous nano-silica/polyvinylidene fluoride composite as efficient ultrafiltration membrane**

Heba Abdallah, Marwa S. Shalaby\*, Antonio Buonerba, Ahmed M. Shaban, Laura Borea, Tiziano Zarra, Vincenzo Belgiorno, Vincenzo Naddeo

*Desalination and Water Treatment 2020, in press.*

DOI:

URL:

**Abstract:** Ultrafiltration mixed matrix membranes were prepared using polyvinylidene fluoride (PVDF) with functionalized mesoporous amino nano-silica (NS). The prepared functionalized mesoporous amino nano-silica (NS) was characterized using XRD, TEM, and FTIR. The results indicate that the addition of amino-functionalized nano-silica improves the hydrophilicity of membrane. Membranes M5 and M6 showed the highest tensile properties. M5 showed a tensile strength of 82.5 Kg/m<sup>2</sup> and elongation of 25.5 %, while tensile strength of 87.9 kg/m<sup>2</sup> and an elongation of 29.3% were found for M6

M6 exhibited an optimal morphology due to formation of a small dense top layer and a wide finger-like sublayer, affording a permeate flux 347 L/m<sup>2</sup>h and a rejection of 98.8% for humic acid concentration 3 g/L. M5 exhibited a more compact spongy-like structure, with permeate flux of 294 L/m<sup>2</sup>h and rejection of 99.7% for humic acid at concentration 3 g/L. The bovine serum albumin was used also as a feed solution in the performance testing, using a feed concentration of 3 g/L. M5 and M6 showed the highest removal percentage for bovine serum albumin of 99.5% and 99.2%, respectively. The fouling test was carried out using humic acid solutions (10 g/L) and bovine serum albumin solution (3 g/L). M5 and M6 showed excellent antifouling properties, where F<sub>RR</sub> of M5 and M6 were respectively of 99.71% and 99.43% for humic acid solution, while F<sub>RR</sub> for M5 and M6 were respectively of 98.5% and 97.96% for BSA solution.

**A31 Article: Thin Film Nanostructure and Polymer Architecture in Semicrystalline Syndiotactic Poly(*p*-methylstyrene)-*cis*-1,4-Polybutadiene Multiblock Copolymers**

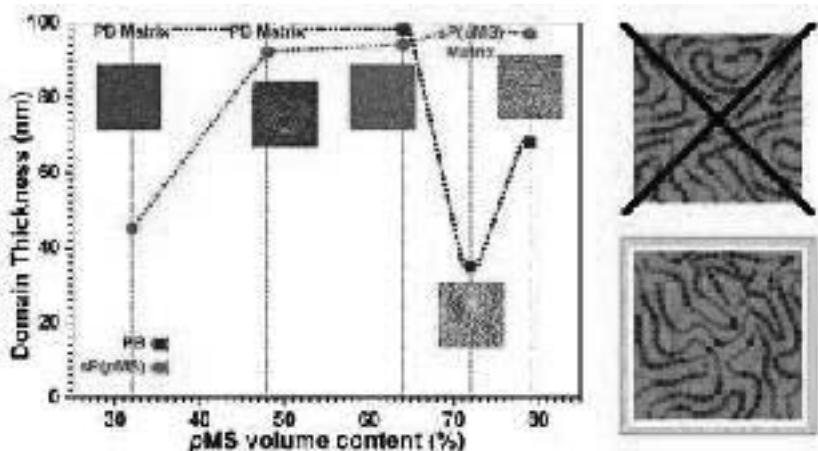
Antonio Buonerba,\* Francesco Della Monica, Vito Speranza, Carmine Capacchione, Stefano Milione and Alfonso Grassi

*Polymer International*, **2019**, *68*, (10), 1681-1687.

DOI: 10.1002/pi.5871

URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/pi.5871>

**Abstract:** The thin film morphology of stereoregular syndiotactic poly(*p*-methylstyrene)-*cis*-1,4-polybutadiene [sP(*p*MS-B)] multiblock copolymers has been investigated by tapping mode atomic force microscopy (TM-AFM) at variance of the polymer composition and monomer block lengths. The morphology of the thin films ranges from isolated circular domains of sP(*p*MS) embedded into a matrix of polybutadiene (PB) to isolated domain of PB embedded into a matrix of sP(*p*MS), passing through bicontinuous (jagged) lamellae when the *p*-methylstyrene (*p*MS) concentration is in the range 20-67 mol%. Multiple folding of the polymer segments, where *i.e.* polymer segments to each other phase are able to generate greater domain, has been postulated and validated by considerations on the polymer architecture, the thermal and crystalline behavior.



**A30 Article: Synthesis and Characterization of Syndiotactic Polystyrene-Polyethylene Block Copolymer**

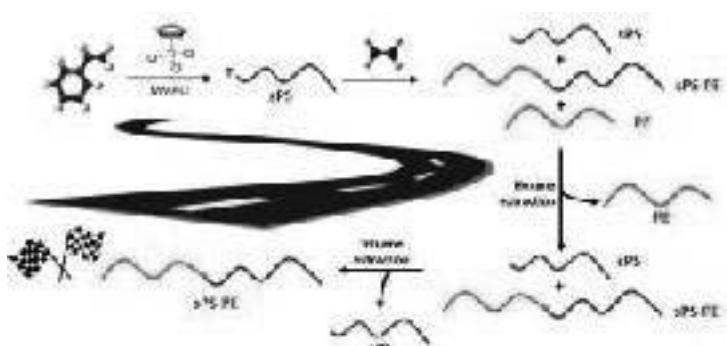
David Hermann Lamparelli, Vito Speranza, Isabella Camurati, Antonio Buonerba,\* and Leone Oliva\*

*Polymers*, **2019**, *11* (4), 698.

DOI: 10.3390/polym11040698.

URL: <https://www.mdpi.com/2073-4360/11/4/698>

**Abstract:** The direct synthesis of syndiotactic polystyrene-block-polyethylene copolymer (sPS-b-PE) with a diblock structure has been achieved. The synthetic strategy consists of the sequential stereocontrolled polymerization of styrene and ethylene in the presence of a single catalytic system: cyclopentadienyltitanium(IV) trichloride activated by modified methylaluminoxane ( $\text{CpTiCl}_3/\text{MMAO}$ ). The reaction conditions suitable for affording the partially living polymerization of these monomers were identified, and the resulting copolymer, purified from contaminant homopolymers, was fully characterized. Gel permeation chromatography coupled with two-dimensional NMR spectroscopy COSY, HSQC, and DOSY confirmed the block nature of the obtained polymer, whose thermal behaviour and thin film morphology were also investigated by differential scanning calorimetry, powder wide angle x-ray diffraction, and atomic force microscopy.



**A29 Full Paper: Green, Mild, and Efficient Friedel-Crafts Benzylation of Scarcely Reactive Arenes and Heteroarenes Under On-Water Conditions**

Pellegrino La Manna, Annunziata Soriente,\* Margherita De Rosa, Antonio Buonerba,\* Carmen Talotta, Carmine Gaeta,\* and Placido Neri

*ChemSusChem*, **2019**, 12, 1673-1683.

DOI: 10.1002/cssc.201900137.

URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cssc.201900137>

*Abstract:* A metal-free Friedel-Crafts benzylation (FCB) of scarcely reactive arenes and heteroarenes has been performed under on-water conditions through an environmentally-sustainable procedure. Our catalytic strategy exploits the hydrophobicity of the resorcinarene macrocycle (1a). The proposed mechanism is based on the activation of benzyl chloride by H-bonding interactions with catalyst 1a. In fact, under on-water conditions the hydrophobic amplification of the strength of the H-bond interactions between the OH groups of the resorcinarene catalyst and the chlorine atom of the benzyl chloride, led to the polarization of the C-Cl bond that consequently promotes the electrophilic attack of the  $\pi$ -nucleophile. Thus, many arenes and heteroarenes have been efficiently benzylated under mild on-water conditions using resorcinarene 1a as the catalyst. The FCB of benzene is industrially relevant for the synthesis of diphenylmethane, thus we here extended the on-water procedure to the gram-scale synthesis of diphenylmethane, starting from benzene and benzyl chloride in the presence of resorcinarene catalyst 1a.



**A28 Review Article: Homogeneous Iron Catalysts in the Reaction of Epoxides with Carbon Dioxide**

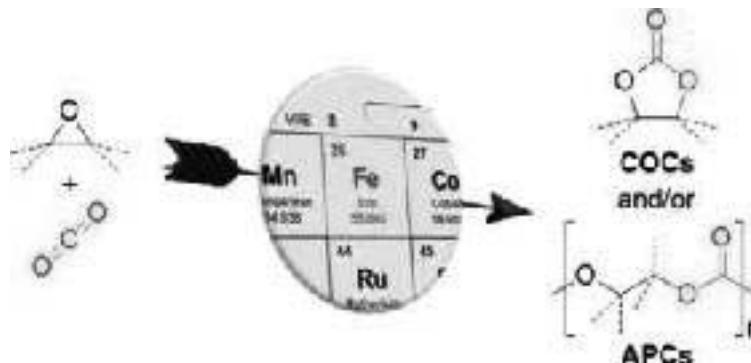
Francesco Della Monica, Antonio Buonerba, Carmine Capacchione\*

*Advanced Synthesis & Catalysis*, **2019**, 361, 265-282.

DOI: 10.1002/adsc.201801281.

URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/adsc.201801281>

*Abstract:* Among the attempts to consolidate the so-called circular economy, the conversion of carbon dioxide ( $\text{CO}_2$ ) into added-value products has gained more and more attention during the last three decades. One of the feasible applications of  $\text{CO}_2$  as a  $\text{C}_1$  building block is its incorporation into cyclic organic carbonates (COCs) and aliphatic polycarbonates (APCs) by reaction with epoxides. A plethora of homogeneous catalytic systems has been reported to promote this reaction, based mainly on magnesium, aluminium, cobalt, chromium and zinc complexes. Despite the abundance and low toxicity of iron, only few examples of catalysts based on this metal had been reported until fifteen years ago, and relevant advances were made only during the last decade. This review seeks to cover this progress and to give a renewed impulse for further research into iron utilisation in this kind of catalysis.



**A27 Communication: Homogeneous Iron Catalysts in the Reaction of Epoxides with Carbon Dioxide**

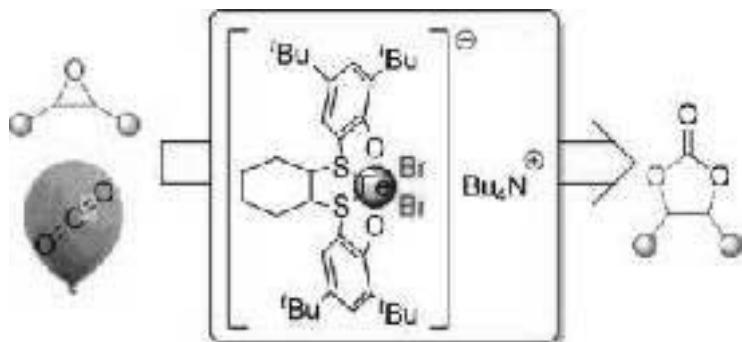
Francesco Della Monica, Antonio Buonerba, Veronica Paradiso, Stefano Milione, Alfonso Grassi, Carmine Capacchione\*

*Advanced Synthesis & Catalysis*, 2019, 361, 283-288

DOI: 10.1002/adsc.201801240.

URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/adsc.201801240>

**Abstract:** A new [OSO]-Fe(III) metallate complex was prepared and characterized. We demonstrated that such metallate is the real catalytic active species for the cycloaddition of CO<sub>2</sub> to the epoxides, formed from the in situ reaction of the related [OSO]-Fe(III) neutral complexes and tetrabutylammonium bromide. The metallate complex was used as a single component catalyst for the formation of cyclic organic carbonates from ten epoxides and CO<sub>2</sub> at 1 bar pressure with good activity.



**A26 Article: Phenylene-Bridged OSSO-Type Titanium Complexes in the Polymerization of Ethylene and Propylene**

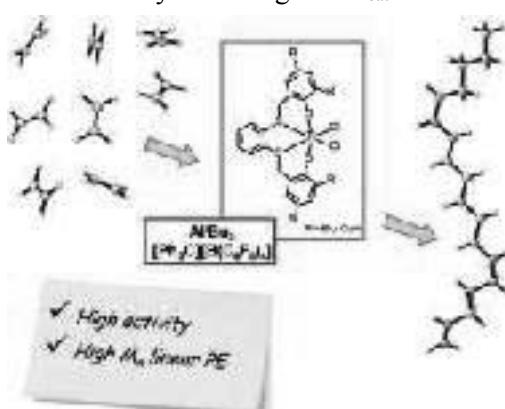
Rosita Lapenta, Antonio Buonerba, Ermanno Luciano, Francesco Della Monica, Assunta De Nisi, Magda Monari, Alfonso Grassi, Carmine Capacchione, Stefano Milione\*

*ACS Omega*, 2018, 3 (9), 11608-11616.

DOI: 10.1021/acsomega.8b01550.

URL: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.8b01550>

**Abstract:** The dichloro titanium complexes (OSO<sub>tBu</sub>)<sub>2</sub>TiCl<sub>2</sub> (**1**) and (OSO<sub>Cum</sub>)<sub>2</sub>TiCl<sub>2</sub> (**2**) bearing *o*-phenylene-bridged OSSO-type ligands [OSO<sub>tBu</sub>-H = 6,6'-(1,2-phenylenebis(sulfanediyl))bis(methylene))bis(2,4-di-*tert*-butyphenol) and OSO<sub>Cum</sub>-H = 6,6'-(1,2-phenylenebis(sulfanediyl))bis(2,4-bis(2-phenylpropan-2-yl)phenol)] were prepared and characterized. The X-ray structure of **1** revealed that Ti atom has an octahedral coordination geometry with an *fac-fac* wrapping of the [OSO] ligand. In solution at 25 °C, **1** mainly retains the C<sub>2</sub> symmetric structure, whereas **2** shows an equilibrium between C<sub>2</sub>- and C<sub>1</sub>-symmetric stereoisomers. Activation of **2** with (Ph<sub>3</sub>C)[B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>4</sub>] led to a highly active catalytic system with an activity of 238 kg<sub>PE</sub>·mol<sub>cat</sub><sup>-1</sup>·bar<sup>-1</sup>·h<sup>-1</sup>; linear polyethylene with a T<sub>m</sub> of 122 °C and M<sub>w</sub> of 107 kDa were obtained under these conditions. Catalyst **1** displayed the moderate activity of 59 kg<sub>PE</sub>·mol<sub>cat</sub><sup>-1</sup>·bar<sup>-1</sup>·h<sup>-1</sup>. Gel permeation chromatography analysis revealed the formation of high-molecular-weight polyethylenes with very large distributions of the molecular weights, indicating a low control of the polymerization process, probably because of the presence of different active species in solution. Density functional theory investigation provides a rational for the relative high-molecular-weight polymers obtained with these complexes. The precatalyst **2** was also active in propylene polymerization producing atactic oligomers terminated with unsaturated end groups.



**A25 Research Article: CO<sub>2</sub> cycloaddition to epoxides promoted by bis-thioether-phenolate Fe(II) and Fe(III) complexes**

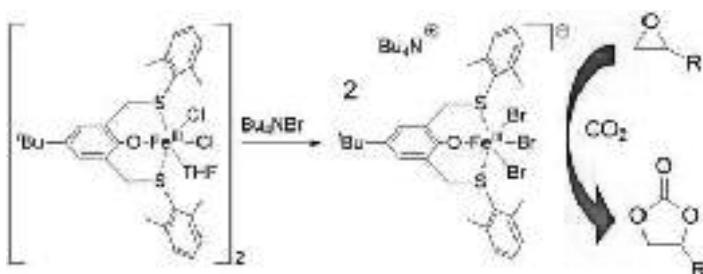
Francesco Della Monica, Mattia Leone, Antonio Buonerba, Alfonso Grassi, Stefano Milione, Carmine Capacchione

*Molecular Catalysis* **2018**, *460*, 46-52.

DOI: 10.1016/j.mcat.2018.09.003.

URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2468823118303948>

**Abstract:** The synthesis and characterization of three new bis-thioether-phenolate monoanionic tridentate [SOS]-type ligands, and the synthesis of the corresponding Fe(II) and Fe(III) complexes are reported. Their application, in combination with tetrabutylammonium bromide (TBAB), as catalysts for the cycloaddition of CO<sub>2</sub> to a number of monosubstituted epoxides and cyclohexene oxide was investigated. For example, epichlorohydrin is converted in the corresponding cyclic carbonate, with a turnover frequency of 155 h<sup>-1</sup> (0.1 mol% of iron, 0.5 mol% of TBAB, 10 bar of CO<sub>2</sub>). With the aim to obtain further information about the catalyst structure-activity relationship and the reaction mechanism, the reaction between the catalyst precursors and TBAB was investigated, suggesting the formation of an anionic metallate species in the case of the Fe(III) complexes that is supposed to be true catalyst. A mechanistic scenario explaining the different behaviour of the Fe(II) and Fe(III) complexes is proposed.



**A24 Full Paper: Tuning of Selectivity and Activity in Aerobic Oxidation and Oxidative Esterification of 5-Hydroxymethylfurfural by Gold Nanoparticles Supported on Nanoporous Polymer Host Matrix**

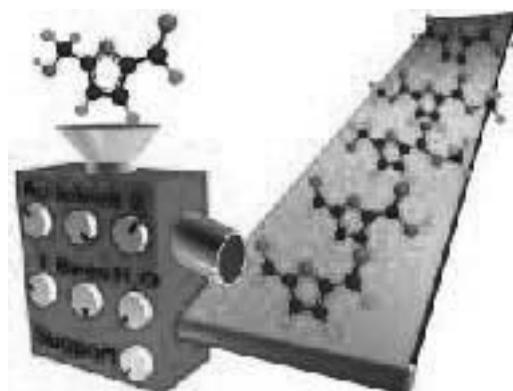
Antonio Buonerba, Salvatore Impemba, Antonella Dentoni Litta, Carmine Capacchione, Stefano Milione, Alfonso Grassi\*

*ChemSusChem*, **2018**, *11* (18), 3139-3149.

DOI: 10.1002/cssc.201801560.

URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cssc.201801560>

**Abstract:** The aerobic oxidation and oxidative esterification of 5-hydroxymethylfurfural (HMF) catalyzed by gold nanoparticles (AuNPs) supported on a semicrystalline nanoporous multiblock copolymer matrix consisting of syndiotactic poly(styrene)-*cis*-1,4-poly(butadiene) (sPSB) have been investigated. Depending on the reaction parameters (support nanoporosity, presence of water, solvent, temperature, co-catalyst, oxygen pressure) the HMF conversion can be finely addressed to the formation of the desired oxidation product, such as 2,5-diformylfuran (DFF), 5-formylfuran-2-carboxylic acid (FFCA), methyl 5-(hydroxymethyl)furan-2-carboxylate (MHMFC), dimethyl furan-2,5-dicarboxylate (DMFC) and furan-2,5-dicarboxylic acid (FDCA); under optimized reaction conditions, AuNPs-sPSB resulted highly effective and selective since the polymer support acts as a conveyor and concentrator of the reactants toward the catalytic sites.



**A23** *Research Article: [OSO]-Type Iron(III) Complexes for the Low-Pressure Reaction of Carbon Dioxide with Epoxides: Catalytic Activity, Reaction Kinetics, and Computational Study*

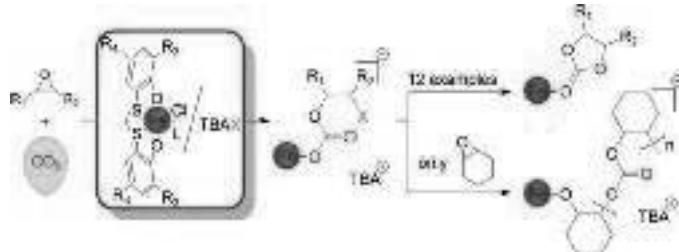
Francesco Della Monica, Bholanath Maity, Thomas Pehl, Antonio Buonerba, Assunta De Nisi, Magda Monari, Alfonso Grassi, Bernhard Rieger,\* Luigi Cavallo,\* Carmine Capacchione\*

*ACS Catalysis*, **2018**, 8, 6882–6893.

DOI: 10.1021/acscatal.8b01695.

URL: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acscatal.8b01695>

*Abstract:* The selective conversion of variously substituted epoxides into the corresponding cyclic carbonates under mild reaction conditions was achieved with mononuclear Fe(III) complexes bearing bis-thioether-diphenolate [OSO]-type ligands, in combination with tetrabutylammonium bromide (TBAB). For example, propylene carbonate was obtained in 1 h at 35 °C (turnover frequency, TOF = 290 h<sup>-1</sup>), from propylene oxide and 1 bar of CO<sub>2</sub> pressure, using 0.1 mol % of the Fe(III) complex and 0.5 mol % of TBAB. Product divergence is observed only for cyclohexene oxide toward the exclusive formation of the aliphatic polycarbonate (TOF = 165 h<sup>-1</sup> at 80 °C and 1 bar of CO<sub>2</sub> pressure, using 0.1 mol % of the Fe(III) complex and 0.1 mol % of tetrabutylammonium chloride). Kinetic investigations indicated reaction orders of two and one, with respect to the Fe(III) complex, for the production of propylene carbonate and the poly(cyclohexene carbonate), respectively. The enthalpy and entropy of activation were determined using the Eyring equation [for propylene carbonate: ΔH<sup>‡</sup> = 8.4 ± 0.7 kcal/mol and ΔS<sup>‡</sup> = -33 ± 3 cal/(mol·K); for poly(cyclohexene carbonate): ΔH<sup>‡</sup> = 11.9 ± 0.3 kcal/mol and ΔS<sup>‡</sup> = -36 ± 2.2 cal/(mol·K)]. Supported by density functional theory based investigations, we propose a mechanistic scenario in which the rate-limiting step is the bimetallic ring opening of the epoxide, in the case of propylene carbonate, and the monometallic insertion of the epoxide in the growing polymer chain, in the case of poly(cyclohexene carbonate).



**A22** *Paper: Dinuclear zirconium complex bearing a 1,5-bridged-calix[8]arene ligand as an effective catalyst for the synthesis of macrolactones*

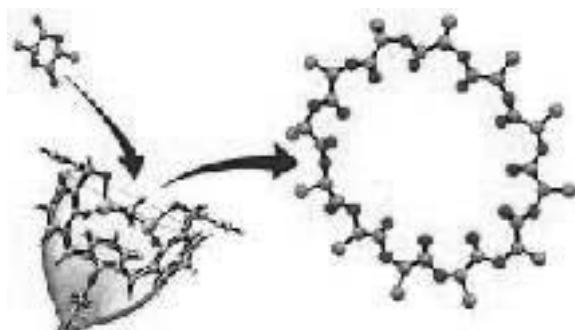
Rosita Lapenta, Nicola Alessandro De Simone, Antonio Buonerba,\* Carmen Talotta,\* Carmine Gaeta, Placido Neri, Alfonso Grassi, Stefano Milione

*Catalysis Science & Technology*, **2018**, 8 (10), 2716-2727

DOI: 10.1039/C7CY02537H

URL: <http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2018/CY/C7CY02537H#!divAbstract>

*Abstract:* “Macrocyclization of Cycles with a Macrocycle.” The synthesis of a dinuclear zirconium complex bearing a 1,5-*m*-xylene-diyl-bridged calix[8]arene ligand and *tert*-butoxide groups, *via* protonolysis of the calix proligand with two equivalents of zirconium(IV) *tert*-butoxide, has been accomplished. <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C and two-dimensional NMR spectroscopy revealed for the complex a conformationally locked solution structure with C<sub>2v</sub> symmetry, where the two zirconium atoms lie in close proximity. The elucidated structure has been validated through DFT calculations. The complex has been successfully used as a catalyst in the ring opening polymerization (ROP) of lactones such as *rac*-lactide (LA), ε-caprolactone (ε-CL) and β-butyrolactone (β-BL). The activities for the ROP of LA compares well with those for the so far reported most active group 4 complexes. Interestingly, the MALDI-TOF-MS investigations on the resulting polymer architecture revealed the highly selective formation of cyclic polymers (70–80 mol%). The cooperation of the intramolecular zirconium atoms has been proved comparing the polymerization results with those obtained using a mononuclear zirconium complex featuring a calix[4]arene ligand.



**A21 Research Article: Improvement of Tensile Properties, Self-Healing and Recycle of Thermoset Styrene/2-Vinylfuran Copolymers via Thermal Triggered Rearrangement of Covalent Crosslink**

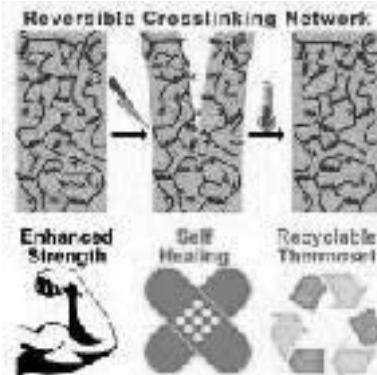
Antonio Buonerba,\* Vito Speranza, Carmine Capacchione, Stefano Milione, Alfonso Grassi

*European Polymer Journal*, **2018**, 99, 368-377

DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2017.12.040

URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0014305717310820>

**Abstract:** Random copolymers of 2-vinylfuran with styrene (*S-co-2VF*s) have been thermoreversibly cross-linked via Diels-Alder (DA) reaction with 1,1'-(methylenedi-4,1-phenylene)bismaleimide (BMI), affording recyclable and self-healable polymers with enhanced mechanical properties. The reversibility of the DA reaction was investigated in detail by solution NMR and solid state FT-IR analysis. The thermal stability and reversibility of DA cycloadducts were studied by differential scanning calorimetry (DSC) in the range of temperature 100–150 °C. The deep knowledge of the thermodynamic and kinetic parameters governing the DA reaction allowed to design an isothermal annealing (44 min at 140 °C) or programmed temperature ramp (30–150 °C) in which the full repair of fractured polymer films or of scratches on the film surface are successfully obtained. The temperature range in which the retro-DA reaction (r-DA) is active well matches the one of the healing process, highlighting the relationship between the reorganization of the polymer network and mendable properties. A method for the evaluation of the tensile properties of thin films at the nanoscale using nanomechanical analysis based on Harmonix-Atomic Force Microscopy was proposed and validated by comparison with the bulk properties assessed by conventional tensile testing. This study highlights the potential of the 2-vinylfuran comonomer for the design of functional recyclable polymers, having thermoreversible crosslinks, self-healing properties and tunable enhanced mechanical properties.



**A20 Research Article: Stereoselective Polymerization of Biosourced Terpenes  $\beta$ -Myrcene and  $\beta$ -Ocimene and Their Copolymerization with Styrene promoted by Titanium Catalysts**

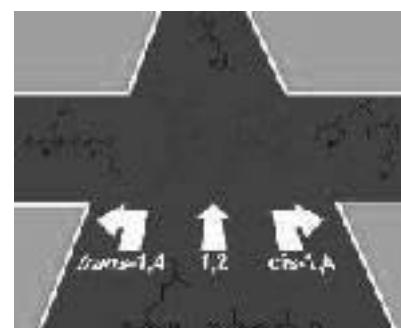
Marco Naddeo, Antonio Buonerba, Ermanno Luciano, Alfonso Grassi, Carmine Capacchione,\* Antonio Proto

*Polymer*, **2017**, 131 (Supplement C), 151-159

DOI: 10.1016/j.polymer.2017.10.028

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032386117309953>

**Abstract:** The stereoselective polymerization of  $\beta$ -myrcene and  $\beta$ -ocimene and their binary copolymerization with styrene promoted by titanium complexes dichloro{1,4-dithiabutane-1,2-diyl-2,2'-bis(4,6-di-*tert*-butyl-phenyl)}titanium (**1**), dichloro{1,4-dithiabutane-1,2-diyl-2,2'-bis[4,6-bis(2-phenyl-2-propyl)phenoxy]}titanium (**2**) and  $Ti(\eta^5-C_5H_5)-(\eta^2-MBMP)Cl$  (**3**) ( $MBMP = 2,2'$ methylenebis(6-*tert*-butyl-4-methylphenoxy)) activated by methylaluminoxane (MAO) is reported. Complex **1** produces a prevalently *trans*-1,4-polymyrcene (92%), the more sterically encumbered pre-catalyst **2** gives a major amount of 3,4-units (40%). Conversely the pre-catalyst **3** produces *cis*-1,4-polymyrcene with good selectivity (92%). The catalyst **1** promotes the copolymerization of  $\beta$ -myrcene with styrene giving the corresponding copolymers in a wide range of composition ( $\chi_s = 0.14-0.90$ ). In the case of  $\beta$ -ocimene the catalysts **1** and **2** produce a polymer with 1,4-*trans* structure (70%) at 70 °C while at lower temperature (0 °C) an isotactic poly-1,2-ocimene (>99%) is obtained. The catalyst **3** produces a less stereoregular polymer with prevalently *cis*-1,4-microstructure (55%). The catalyst **2** also promotes the copolymerization of  $\beta$ -ocimene with styrene in a wide range of composition ( $\chi_s = 0.23-0.87$ ).



**A19 Article: Stereorigid OSSO-Type Group 4 Metal Complexes in the Ring-Opening Polymerization of *rac*-Lactide**

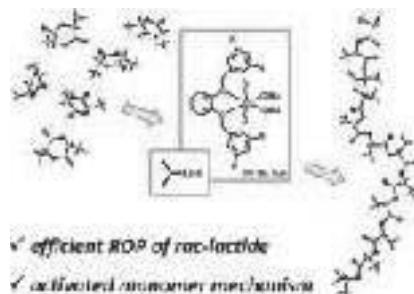
Rosita Lapenta, Antonio Buonerba, Assunta De Nisi, M. Monari, Alfonso Grassi, Stefano Milione,\* Carmine Capacchione

*Inorganic Chemistry*, **2017**, *56*, 3447-3458

DOI: 10.1021/acs.inorgchem.6b02987

URL: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.inorgchem.6b02987>

**Abstract:** The synthesis and characterization of a series of group 4 metal complexes of general formula  $\{\text{OSSO}_X\}M(\text{OR})_2$  ( $X = \text{R}'\text{Bu}$ ,  $M = \text{Zr}$  (**1**);  $X = \text{cumyl}$ ,  $M = \text{Zr}$ ,  $\text{R}' = \text{R}'\text{Bu}$  (**2**);  $X = \text{cumyl}$ ,  $M = \text{Ti}$ ,  $\text{R}' = \text{iPr}$  (**4**);  $X = \text{cumyl}$ ,  $M = \text{Hf}$ ,  $\text{R}' = \text{R}'\text{Bu}$  (**5**)) and  $\{\text{OSSO}_X\}_2\text{Zr}$  ( $X = \text{Cl}$  (**3**)) supported by *o*-phenylene-bridged bis(phenolato) ligands ( $\text{OSSO}_{\text{tBu}}\text{-}H = 6,6'-(1,2\text{-phenylenebis(sulfanediyl)})\text{bis}(\text{methylene})\text{bis}(2,4\text{-di-}tert\text{-butyphenol})$ ;  $\text{OSSO}_{\text{Cum}}\text{-}H = 6,6'-(1,2\text{-phenylenebis(sulfanediyl)})\text{bis}(\text{methylene})\text{bis}(2,4\text{-bis}(2\text{-phenylpropan-2-yl})\text{phenol})$ ;  $\text{OSSO}_{\text{Cl}}\text{-}H = 6,6'-(1,2\text{-phenylenebis(sulfanediyl)})\text{bis}(\text{methylene})\text{bis}(2,4\text{-dichlorophenol})$ ) are described herein. Complexes **1–5** were readily obtained by  $\sigma$ -bond metathesis reactions between the proligand and the appropriate homoleptic metal precursor. The reaction with  $\text{OSSO}_{\text{Cl}}$  yielded the bis-ligand complex  $\{\text{OSSO}_{\text{Cl}}\}_2\text{Zr}$  (**3**) regardless of the  $\text{OSSO}_{\text{Cl}}\text{-}H/\text{Zr}(\text{O}'\text{Bu})_4$  molar ratio or experimental conditions. All complexes were characterized in solution using NMR spectroscopy and, in the case of **2**, by single-crystal X-ray diffraction experiments. These complexes show a *fac-fac* ligand wrapping and a *cis* relationship between the other two monodentate ligands; zirconium and hafnium complexes **1–3** and **5** are configurationally stable, whereas titanium complex **4** is fluxional in solution at room temperature. The complexes tested in the ring-opening polymerization (ROP) of racemic-lactide showed, except in the case of **3**, moderate rates and good levels of polymerization control. Upon addition of an exogenous alcohol (isopropyl alcohol or *tert*-butyl alcohol) efficient binary catalytic systems were achieved. Polymerizations were well-controlled, as testified by the linear growth of the molecular weight as polymerization proceeded, narrow polydispersity indices, and molecular weights close to those expected on the basis of added alcohol amounts. Experimental and theoretical evidence is provided that ROP reactions operate according to an activated monomer mechanism.



**A18 Full Paper: A Comprehensive Depiction of the Furan-Maleimide Coupling via Kinetic and Thermodynamic Investigations of the Diels-Alder Reaction of Poly(styrene-co-2-vinylfuran) with Maleimides**

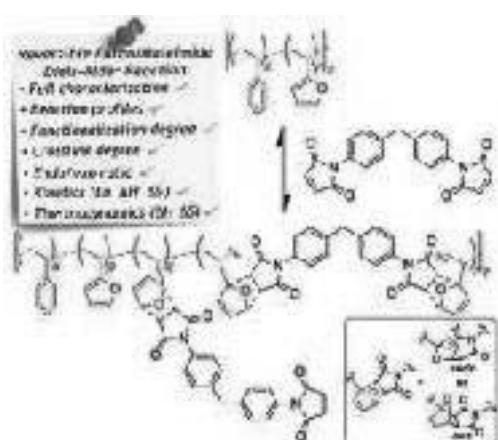
Antonio Buonerba,\* Rosita Lapenta, Sheila Ortega Sánchez, Carmine Capacchione, Stefano Milione and Alfonso Grassi\*

*ChemistrySelect*, **2017**, *2*, 1605-1612

DOI: 10.1002/slct.201602071

URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/slct.201602071>

**Abstract:** Copolymers of styrene with 2-vinylfuran (S-*co*-2VF) were reacted with maleimides to yield functionalized copolymers via Diels-Alder (DA) reaction. The polymer compositions and the chemical structure of the DA cycloadducts were fully characterized by means of NMR spectroscopy. The kinetic and thermodynamic parameters were thus assessed for the DA and backward reaction (r-DA) to gain information on this click reaction using a set of equations properly designed. The VT NMR monitoring of the reactions allowed to calculate the apparent rate constants for the formation and decoupling of the DA cycloadducts with both the *endo* and *exo* configurations in the range of temperature 70–120 °C. The activation energy barriers of  $47.8 \pm 5.6 \text{ kJ mol}^{-1}$  and  $174 \pm 17 \text{ kJ mol}^{-1}$  were calculated from the Arrhenius plots for the DA and r-DA reactions, respectively. The Eyring-Polanyi equation permitted also to assess the enthalpic and entropic contributions of  $171 \pm 17 \text{ kJ mol}^{-1}$  and  $0.09 \pm 0.15 \text{ kJ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$  for the r-DA reaction. The thermodynamic equilibrium constants yielded the enthalpy ( $-157 \pm 14 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) and entropy ( $-370 \pm 40 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ) of formation of the DA cycloadducts.



**A17 Research Article: Highly efficient and selective reduction of nitroarenes into anilines catalyzed by gold nanoparticles incarcerated in a nanoporous polymer matrix: Role of the polymeric support and insight into the reaction mechanism**

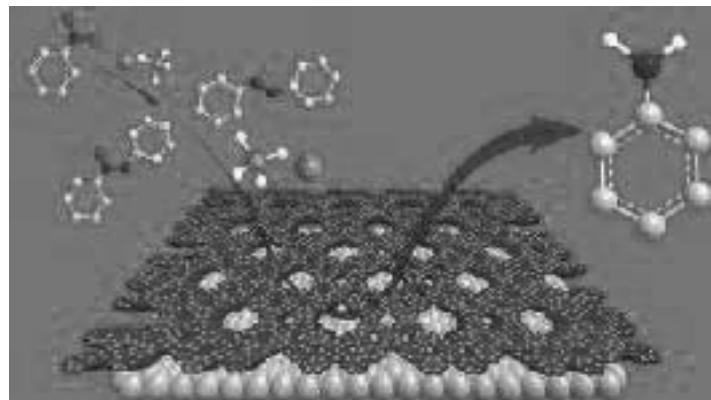
Annarita Noschese, Antonio Buonerba, Patrizia Canton, Stefano Milione, Carmine Capacchione, Alfonso Grassi\*

*Journal of Catalysis*, **2016**, 340, 30-40

DOI: 10.1016/j.jcat.2016.05.005

URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021951716300495>

*Abstract:* Gold nanoparticles supported onto a nanoporous semicrystalline polymorphic polymer matrix consisting of syndiotactic polystyrene-*cis*-1,4-polybutadiene multiblock copolymer (AuNPs-sPSB) were investigated as catalyst in the reduction of nitroarenes into anilines using sodium borohydride as reductant. The crystalline phase and the morphology of the polymeric support were varied to assess their influence on the selectivity of the reaction pathway. The  $\beta$  and  $\gamma$  crystalline forms, which are not permeable to small molecules, led to a partial reduction of nitrobenzene into both azoxybenzene and diazobenzene whereas the porous  $\delta$  and  $\varepsilon$  crystalline forms efficiently catalyze the complete reduction into aniline through the *condensation route* of the reaction mechanism proposed by Haber, achieving the highest activities reported so far for this reaction.



**A16 Article: Thioetherphenolate group 4 metal complexes in the ring opening polymerization of *rac*- $\beta$ -Butyrolactone**

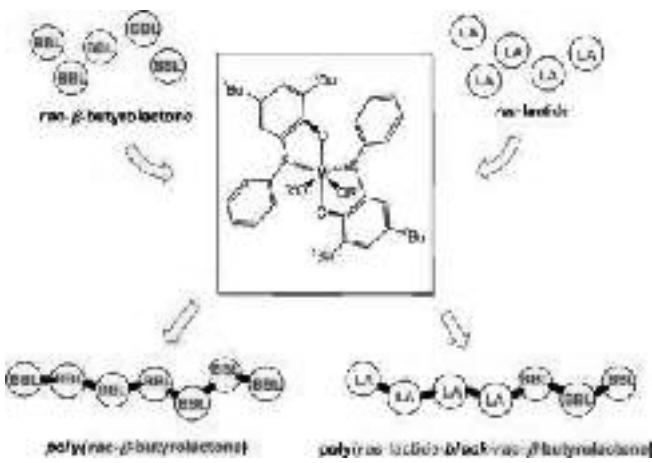
Ermanno Luciano, Antonio Buonerba, Alfonso Grassi, Stefano Milione\* and Carmine Capacchione

*Journal of Polymer Science, Part A: Polymer Chemistry*, **2016**, 54, 3132-3139

DOI: 10.1002/pola.28198

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/pola.28198>

*Abstract:* Group 4 complexes **1–3** [**1** = (*t*-BuOS)<sub>2</sub>Ti(O-*i*-Pr)<sub>2</sub>; **2** = (*t*-BuOS)<sub>2</sub>Zr(O-*t*-Bu)<sub>2</sub>; **3** = (*t*-BuOS)<sub>2</sub>Hf(O-*t*-Bu)<sub>2</sub>] supported by two phenolate bidentate ligands (*t*-BuOS-H = 4,6-di-*t*-tert-butyl-2-phenylsulfanylphenol) promote the well-controlled ring opening polymerization of *rac*- $\beta$ -butyrolactone. In presence of isopropanol, low dispersities and molecular weights proportional to the equivalents of isopropanol are achieved. Moreover, the zirconium complex is effective in the copolymerization of *rac*- $\beta$ -butyrolactone with *rac*-lactide. The <sup>13</sup>C nuclear magnetic resonance analysis revealed that the obtained copolymers have a tapered diblock microstructure consisting of an initial block composed of lactide sequences and a terminal block composed of butyrolactone sequences.



**A15 Invited Review: Olefin–Styrene Copolymers**

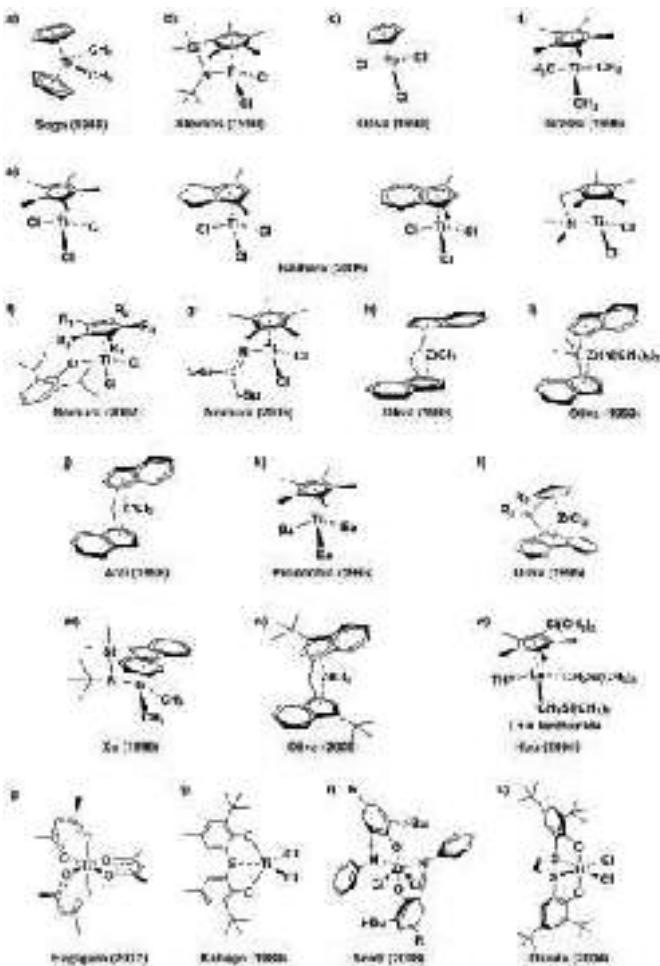
Nunzia Galdi, Antonio Buonerba and Leone Oliva\*

*Polymers*, **2016**, *8*, 405

DOI: 10.3390/polym8110405

URL: <http://www.mdpi.com/2073-4360/8/11/405>

*Abstract:* In this review are reported some of the most relevant achievements in the chemistry of the ethylene–styrene copolymerization and in the characterization of the copolymer materials. Focus is put on the relationship between the structure of the catalyst and that of the obtained copolymer. On the other hand, the wide variety of copolymer architecture is related to the properties of the material and to the potential utility.



**A14 Full Paper: Glycidol: an Hydroxyl-Containing Epoxide Playing the Double Role of Substrate and Catalyst for CO<sub>2</sub> Cycloaddition Reactions**

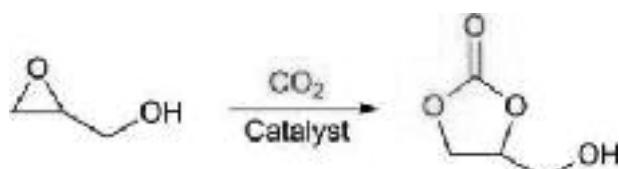
Francesco Della Monica, Antonio Buonerba, Alfonso Grassi, Carmine Capacchione,\* Stefano Milione

*ChemSusChem*, **2016**, *9*, 3457–3464

DOI: 10.1002/cssc.201601154

URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cssc.201601154>

*Abstract:* Glycidol is converted into glycerol carbonate (GC) by coupling with CO<sub>2</sub> in the presence of tetrabutylammonium bromide (TBAB) under mild reaction conditions ( $T=60\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $P_{\text{CO}_2}=1\text{ MPa}$ ) in excellent yields (99 %) and short reaction time ( $t=3\text{ h}$ ). The unusual reactivity of this substrate compared to other epoxides, such as propylene oxide, under the same reaction conditions is clearly related to the presence of a hydroxyl functionality on the oxirane ring. Density functional theory calculations (DFT) supported by <sup>1</sup>H NMR experiments reveal that the unique behavior of this substrate is a result of the formation of intermolecular hydrogen bonds into a dimeric structure, activating this molecule to nucleophilic attack, and allowing the formation of GC. Furthermore, the glycidol/TBAB catalytic system acts as an efficient organocatalyst for the cycloaddition of CO<sub>2</sub> to various oxiranes.



**A13 Full Paper: Coupling of Carbon Dioxide with Epoxides Efficiently Catalyzed by Thioether-Triphenolate Bimetallic Iron(III) Complexes: Catalyst Structure–Reactivity Relationship and Mechanistic DFT Study**

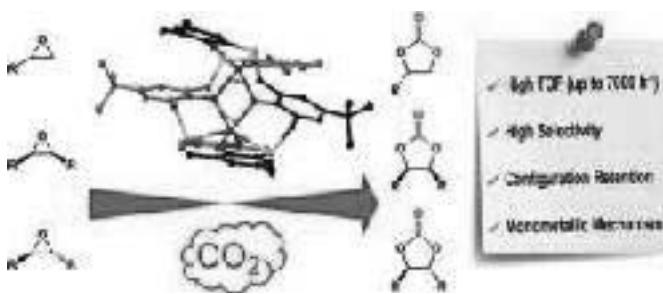
Francesco Della Monica, Sai V. C. Vummaleti, Antonio Buonerba, Assunta De Nisi, Magda Monari, Stefano Milione, Alfonso Grassi, Luigi Cavallo\* and Carmine Capacchione\*

*Advanced Synthesis & Catalysis*, 2016, 358, 3231-3243

DOI: 10.1002/adsc.201600621

URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adsc.201600621>

**Abstract:** A series of dinuclear iron(III)<sup>I</sup> complexes supported by thioether-triphenolate ligands have been prepared to attain highly Lewis acidic catalysts. In combination with tetrabutylammonium bromide (TBAB) they are highly active catalysts in the synthesis of cyclic organic carbonates through the coupling of carbon dioxide to epoxides with the highest initial



turnover frequencies reported to date for the conversion of propylene oxide to propylene carbonate for iron-based catalysts (5200 h<sup>-1</sup>; 120 °C, 2 MPa, 1 h). In particular, these complexes are shown to be highly selective catalysts for the coupling of carbon dioxide to internal oxiranes affording the corresponding cyclic carbonates in good yield and with retention of the initial stereochemical configuration. A density functional theory (DFT) investigation provides a rational for the relative high activity found for these Fe(III) complexes, showing the fundamental role of the hemilabile sulfur atom in the ligand skeleton to promote reactivity. Notably, in spite of the dinuclear nature of the catalyst precursor only one metal center is involved in the catalytic cycle.

**A12 Paper: Polymerization of ethylene and propylene promoted by group 4 metal complexes bearing thioetherphenolate ligands**

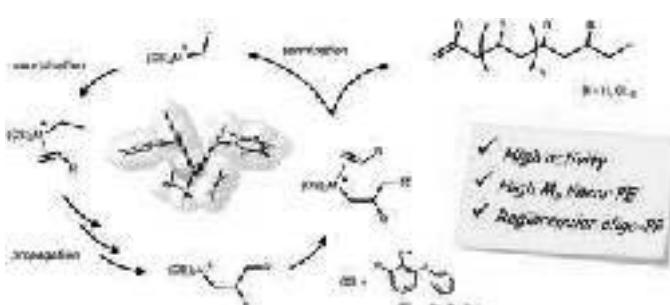
Ermanno Luciano, Francesco Della Monica, Antonio Buonerba, Alfonso Grassi, Carmine Capacchione\* and Stefano Milione

*Polymer Chemistry*, 2015, 6, 4657-4668

DOI: 10.1039/C5PY00488H

URL: <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/py/c5py00488h/unauth#!divAbstract>

**Abstract:** The synthesis of four new group 4 metal complexes **1–4** (**1** = (t-BuOS)<sub>2</sub>TiCl<sub>2</sub>; **2** = (CumOS)<sub>2</sub>TiCl<sub>2</sub>; **3** = (t-BuOS)<sub>2</sub>Zr(CH<sub>2</sub>Ph)<sub>2</sub>; **4** = (CumOS)<sub>2</sub>Zr(CH<sub>2</sub>Ph)<sub>2</sub>) bearing two bidentate thioetherphenolate ligands (t-BuOS-H = 4,6-di-tert-butyl-2-phenylsulfanylphenol; CumOS-H = 4,6-bis-( $\alpha,\alpha$ -dimethylbenzyl)-2-phenylsulfanylphenol) has been accomplished. These complexes exhibit fluxional behaviour in solution and this was



revealed by VT <sup>1</sup>H NMR and supported by density functional theory (DFT) calculations. All these complexes are active catalysts in ethylene polymerization, producing linear polyethylene. Notably, the zirconium complex **3** displays, under proper reaction conditions, very high activity (1422 kg<sub>PE</sub> mol<sub>cat</sub><sup>-1</sup> bar<sup>-1</sup> h<sup>-1</sup>), which compares well with that of the most active post-metallocene catalysts. Furthermore, propylene polymerization catalyzed by the titanium complex **1** yields atactic polypropylene, whereas the zirconium complexes **3** and **4** selectively produce oligopropylene with Schultz–Flory distribution. NMR analysis of the unsaturated chain ends in the latter samples provides evidence of a regioselective

propagation reaction with a large preference for 1,2-monomer insertion. DFT calculations allowed the modelling of the elementary reaction steps, namely, the chain propagation reaction,  $\beta$ -hydrogen elimination and transfer, highlighting the importance of the flexibility and steric hindrance of the ancillary ligands in determining the high activity of the title catalysts.

**A11 Invited Article: Thioether-triphenolate bimetallic iron(III) complexes as robust and highly efficient catalysts for cycloaddition of carbon dioxide to epoxides**

Antonio Buonerba, Francesco Della Monica, Assunta De Nisi, Ermanno Luciano, Stefano Milione, Alfonso Grassi, Carmine Capacchione,\* Bernhard Rieger

*Faraday Discussions*, **2015**, 183, 83-95

DOI: 10.1039/C5FD00070J

URL: <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/fd/c5fd00070j#!divAbstract>

*Abstract:* The selective and effective synthesis of organic carbonates under mild conditions, starting from carbon dioxide and oxiranes, catalyzed by metal complexes is currently a focus of interest for both industrial and academic researchers. We recently developed a novel thioether-triphenolate iron(III) catalyst ( $C_{t\text{-}Bu}$ ) that has proven to be highly active for the coupling of  $CO_2$  with epoxides, resulting in cyclic organic carbonates under solvent-free conditions. In the current work, the properties of this novel class of catalysts were extensively investigated. In particular, the steric properties of the ligand were modulated by changing the substituents of the aromatic rings in order to obtain a deeper knowledge of the relationship between the complex structure and catalytic performance/selectivity for these iron complexes. Notably, the less steric demanding iron(III)  $C_H$  complex synthesized shows, when activated by *n*-tetrabutylammonium bromide, an impressive turnover frequency (TOF) of  $3800\text{ h}^{-1}$  for the formation of propylene carbonate and glycerol carbonate which are, by far, the highest reported for an iron based catalyst and compares well with the most active catalyst based on other metals.

**A10 Communication: Novel iron(III) catalyst for the efficient and selective coupling of carbon dioxide and epoxides to form cyclic carbonates**

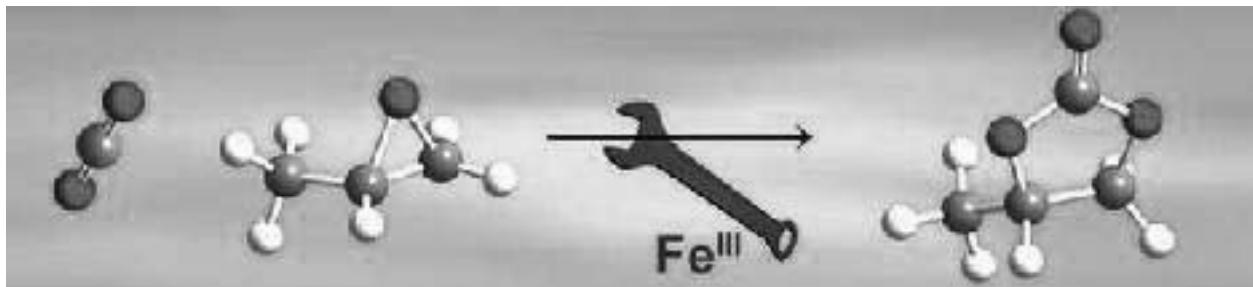
Antonio Buonerba, Assunta De Nisi, Alfonso Grassi, Stefano Milione, Carmine Capacchione,\* S. Vagin, Bernhard Rieger,

*Catalysis Science & Technology*, **2015**, 5, 118-123

DOI: 10.1039/C4CY01187B

URL: <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/cy/c4cy01187b#!divAbstract>

*Abstract:* “*Re-cycling carbon dioxide with iron*”. The synthesis of cyclic organic carbonates in high yield, stereo- and chemo-selectivity was accomplished through the coupling of carbon dioxide and epoxides, catalysed by a novel air-stable and easy-to-handle thioether-triphenolate iron(III) complex.



**A9 Paper: Poly(lactide-co- $\epsilon$ -caprolactone) copolymers prepared using bis-thioetherphenolate group 4 metal complexes: synthesis, characterization and morphology**

Francesco Della Monica, Ermanno Luciano, Antonio Buonerba, Alfonso Grassi, Stefano Milione, Carmine Capacchione,\*

*RSC Advances*, **2014**, 4, 51262-51267 (2014)

DOI: 10.1039/C4RA10255J

URL: <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/ra/c4ra10255j#!divAbstract>

**Abstract:** Titanium and zirconium complexes **1–3** (**1** = (<sup>t</sup>-BuOS)<sub>2</sub>Ti(O-*i*-Pr)<sub>2</sub>; **2** = (<sup>t</sup>-BuOS)<sub>2</sub>Zr(O-*t*-Bu)<sub>2</sub>; **3** = (<sup>Cum</sup>OS)<sub>2</sub>Zr(O-*t*-Bu)<sub>2</sub>) supported by two phenolate bidentate ligands (<sup>t</sup>-BuOS-H = 4,6-di-*tert*-butyl-2-phenylsulfanylphenol and <sup>Cum</sup>OS-H = 4,6-di-cumyl-2-phenylsulfanylphenol) promoted the copolymerization of L-lactide with  $\epsilon$ -caprolactone. The reactivity displayed by the two monomers during the copolymerization experiments and the microstructure disclosed by <sup>13</sup>C NMR analysis indicated a gradient distribution of the two monomers along the polymer chain. Copolymers with high  $\epsilon$ -caprolactone content showed a large scale formation of crystalline spherulites prone to perfection of the crystallinity upon thermal annealing at 50 °C. Differently L-lactide rich copolymers revealed a thin film morphology consisting of small rigid domains of L-lactide segments of about 15 nm embedded in a soft matrix of the counterpart. Copolymers with comparable mole fractions of the two monomers were entirely amorphous.

**A8 Full Paper: Highly Efficient Direct Aerobic Oxidative Esterification of Cinnamyl Alcohol with Alkyl Alcohols Catalysed by Gold Nanoparticles Incarcerated in a Nanoporous Polymer Matrix: A Tool for Investigating the Role of the Polymer Host**

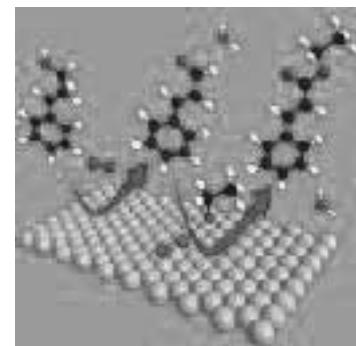
Antonio Buonerba, Annarita Noschese and Alfonso Grassi\*

*Chemistry - A European Journal*, **2014**, 20, 18, 5478-5486

DOI: 10.1002/chem.201303880

URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/chem.201303880>

**Abstract:** The selective aerobic oxidation of cinnamyl alcohol to cinnamaldehyde, as well as direct oxidative esterification of this alcohol with primary and secondary aliphatic alcohols, were achieved with high chemoselectivity by using gold nanoparticles supported in a nanoporous semicrystalline multi-block copolymer matrix, which consisted of syndiotactic polystyrene-*co*-*cis*-1,4-polybutadiene. The cascade reaction that leads to the alkyl cinnamates occurs through two oxidation steps: the selective oxidation of cinnamyl alcohol to cinnamaldehyde, followed by oxidation of the hemiacetal that results from the base-catalysed reaction of cinnamaldehyde with an aliphatic alcohol. The rate constants for the two steps were evaluated in the temperature range 10–45 °C. The cinnamyl alcohol oxidation is faster than the oxidative esterification of cinnamaldehyde with methanol, ethanol, 2-propanol, 1-butanol, 1-hexanol or 1-octanol. The rate constants of the latter reaction are pseudo-zero order with respect to the aliphatic alcohol and decrease as the bulkiness of the alcohol is increased. The activation energy ( $E_a$ ) for the two oxidation steps was calculated for esterification of cinnamyl alcohol with 1-butanol ( $E_a=57.8\pm11.5$  and  $62.7\pm16.7$  kJ mol<sup>-1</sup> for the first and second step, respectively). The oxidative esterification of cinnamyl alcohol with 2-phenylethanol follows pseudo-first-order kinetics with respect to 2-phenylethanol and is faster than observed for other alcohols because of fast diffusion of the aromatic alcohol in the crystalline phase of the support. The kinetic investigation allowed us to assess the role of the polymer support in the determination of both high activity and selectivity in the title reaction.



**A7 Paper: Nanostructured Ethylene-Styrene Copolymers**

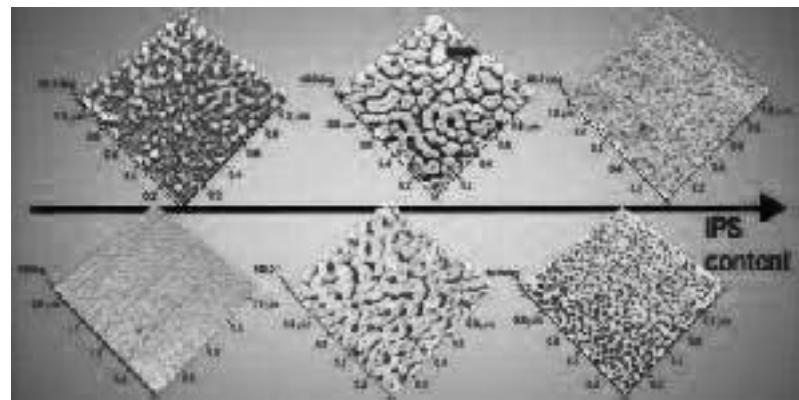
Nunzia Galdi, Antonio Buonerba,\* Patrizia Oliva and Leone Oliva\*

*Polymer Chemistry*, **2014**, 5, 3045-3052

DOI: 10.1039/C3PY01703F

URL: <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/py/c3py01703f#!divAbstract>

**Abstract:** A judicious choice of a polyinsertion catalyst and monomer feed composition allows the one-pot synthesis of ethylene-styrene copolymers with an unprecedented structure, containing an isotactic polystyrene (iPS) block joined to an isotactic ethylene-*alt*-styrene sequence (iP(E-*alt*-S)). Both segments in the native polymer give rise to crystallinity. The characterization of the materials has been performed through different techniques. In particular AFM analysis of samples obtained by spin coating shows the presence of either circular nano-domains with about a 30 nm diameter due to self-assembling of the copolymer chains or bicontinuous nanostructured phases depending on the block lengths.



**A6 Paper: Novel nanostructured semicrystalline ionomers by chemoselective sulfonation of multiblock copolymers of syndiotactic polystyrene with polybutadiene**

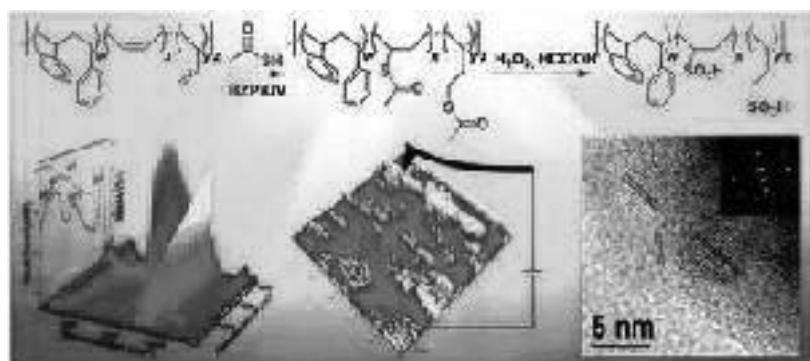
Antonio Buonerba,\* Vito Speranza, Patrizia Canton, Carmine Capacchione, Stefano Milione and Alfonso Grassi\*

*RSC Advances*, **2014**, 4, 60158-60167

DOI: 10.1039/C4RA13253J

URL: <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/ra/c4ra13253j/unauth#!divAbstract>

**Abstract:** Novel semi-crystalline sulfonated copolymers (sPS(B-SA)) have been synthesized by sulfonation of multiblock copolymers of syndiotactic polystyrene with *cis*-1,4-polybutadiene (sPSB), using a two-stage solution process comprising the addition of thiolacetic acid to the butadiene units, followed by the *in situ* oxidation of the thioacetyl moieties with performic acid. The sulfonation process is quantitative, chemoselective, cheap and more environmentally benign than similar methods previously reported; in addition it allows achieving high ion exchange capacity values (up to 4.48 equiv. per kg). The sPS(B-SA)s are crystalline, preserving the native polymorphic behavior of the crystalline syndiotactic polystyrene segments. Thin films of sPS(B-SA) samples show a phase separated morphology at the nanometer scale evidenced by tapping mode and tunneling current atomic force microscopy; proton conductive regions embedded in a hard-hydrophobic matrix of syndiotactic polystyrene were actually observed.



**A4 Full Paper: Syndiotactic Polystyrene-block-Poly(methyl methacrylate) Copolymer via Click Chemistry**

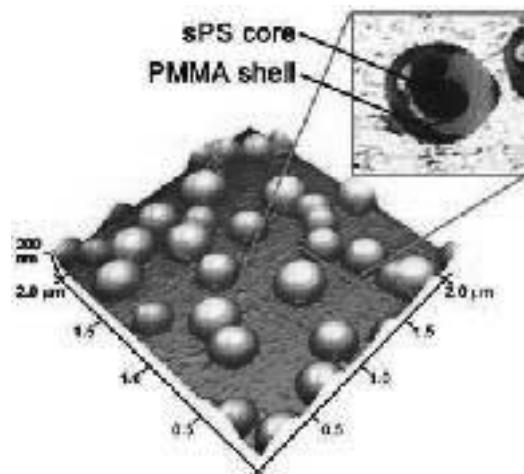
Carmine Capacchione,\* Antonella De Roma, Antonio Buonerba, Vito Speranza, Stefano Milione and Alfonso Grassi

*Macromolecular Chemistry and Physics*, **2013**, **214**, 1990-1997

DOI: 10.1002/macp.201300237

URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/macp.201300237>

**Abstract:** Syndiotactic polystyrene-block-poly(methyl methacrylate) copolymer is synthesized via the Huisgen 1,3 dipolar click cycloaddition reaction of properly end functionalized syndiotactic polystyrene (sPS) and poly(methyl methacrylate) (PMMA) polymer segments. The end functionalized sPS is obtained by quenching the styrene polymerization catalyzed by a half-titanocene catalyst with *N*-bromosuccinimide to yield sPS-Br, then converted into the corresponding azide (sPS-N<sub>3</sub>) by reaction with sodium azide. The PgBiB-PMMA segment is synthesized by ATRP of MMA using the PgBiB initiator carrying the alkyne functionality. The formation of core-shell micelles with size depending on the copolymer composition is highlighted by AFM.



**A5 Article: Binary Copolymerization of *p*-Methylstyrene with Butadiene and Isoprene Catalyzed by Titanium Compounds Showing Different Stereoselectivity**

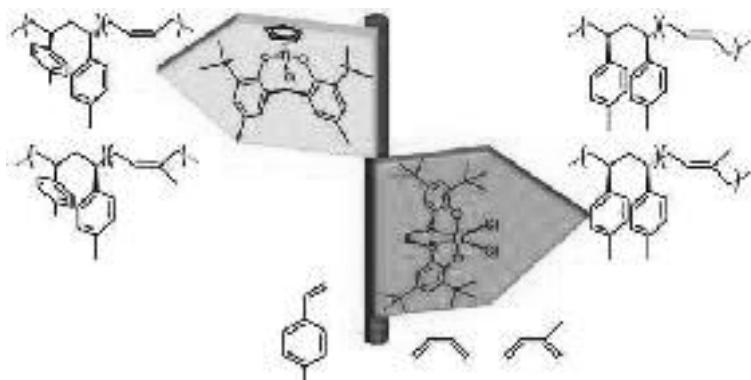
Antonio Buonerba, Maria Fienga, Stefano Milione, Cinzia Cuomo, Alfonso Grassi, Antonio Proto, Carmine Capacchione\*

*Macromolecules*, **2013**, **46**, 8449-8457

DOI: 10.1021/ma401621v

URL: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ma401621v>

**Abstract:** The synthesis of *p*-methylstyrene-butadiene and *p*-methylstyrene-isoprene binary copolymers promoted by the titanium complexes Ti( $\eta^5$ -C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>)-(κ<sup>2</sup>-MBMP)Cl (**1**) (MBMP = 2,2'-methylenebis(6-*tert*-butyl-4-methylphenoxy)) and chloro{1,4-dithiabutane-2,2'-bis(4,6-di-*tert*-butylphenoxy)}titanium (**2**) activated by methylaluminoxane (MAO) is reported. Syndiotactic poly(*p*-methylstyrene)-co-*cis*-1,4-poly(butadiene) and syndiotactic poly(*p*-methylstyrene)-co-*cis*-1,4-polyisoprene were obtained using catalyst **1**, whereas isotactic poly(*p*-methylstyrene)-co-*trans*-1,4-poly(butadiene) and isotactic poly(*p*-methylstyrene)-co-*trans*-1,4-polyisoprene were obtained using the catalyst **2**. <sup>13</sup>C NMR analysis of the copolymer microstructure allowed to assess the monomer block lengths and distribution in the polymer chain, revealing a blocky distribution of the two monomers along the polymer chain in the presence of the catalyst **1** and a random distribution with the catalyst **2** for both binary copolymers.



**A3 Article: Novel Synthetic Strategy for the Sulfonation of Polybutadiene and Styrene-Butadiene Copolymers**

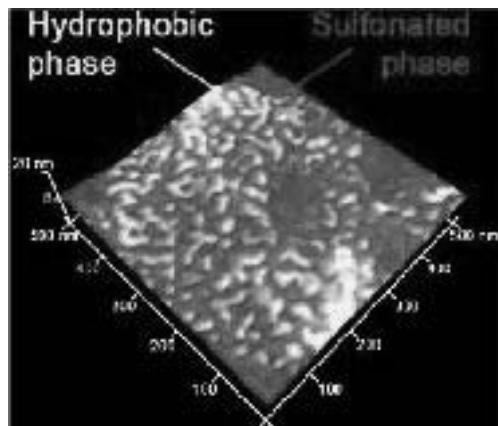
Antonio Buonerba, Vito Speranza and Alfonso Grassi\*

*Macromolecules*, 2013, 46, 778-784

DOI: 10.1021/ma301972m

URL: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ma301972m>

*Abstract:* The selective and quantitative sulfonation of polybutadiene (PB) and triblock copolymers polystyrene-*b*-polybutadiene-*b*-polystyrene (SBS) has been successfully obtained through a novel procedure consisting of two reaction steps carried out in a single batch: free radical addition of thiolacetic acid to olefinic double bonds followed by autocatalytic oxidation of the thioacetylated polymer with *in situ* generated organic peracids. The polymers resulting from the two reactions were fully characterized by NMR, FTIR, and elemental analysis; the ion exchange capacity (IEC) of the sulfonated polymers was assessed by elemental analysis and titration with NaOH. Critical desulfonation temperatures of the poly(alkylsulfonate)s were observed in the range 160–270 °C, whereas the thermal decomposition starts at about 380 °C. The TUNA-AFM analysis of a sample of SBS containing 79 mol % of alkylsulfonic groups showed a phase-separated morphology consisting of polystyrene domains of about 28 nm embedded in the sulfonated polymer matrix.



**A2 Full Paper: Gold Nanoparticles Incarcerated in Nanoporous Syndiotactic Polystyrene Matrices as New and Efficient Catalysts for Alcohol Oxidations**

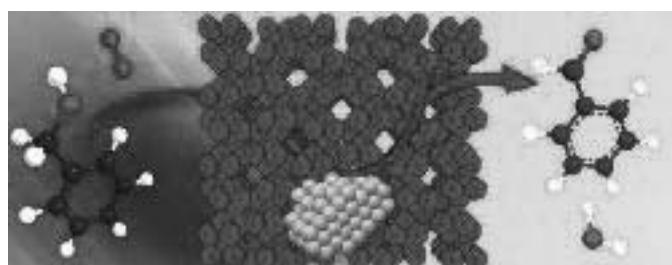
Antonio Buonerba, Cinzia Cuomo, Sheila Ortega Sánchez, Patrizia Canton and Alfonso Grassi\*

*Chemistry - A European Journal*, 2012, 18, 709-715

DOI: 10.1002/chem.201101034

URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/chem.201101034>

*Abstract:* The controlled synthesis of gold nanoparticles (AuNPs), incarcerated in a semicrystalline nanoporous polymer matrix that consisted of a syndiotactic polystyrene-*co*-*cis*-1,4-polybutadiene multi-block copolymer is described. This catalyst was successfully tested in the oxidation of primary and secondary alcohols, in which we used dioxygen as the oxidant under mild conditions. Accordingly, ( $\pm$ )-1-phenylethanol was oxidised to acetophenone in high yields (96 %) in 1 h, at 35 °C, whereas benzyl alcohol was quantitatively oxidised to benzaldehyde with a selectivity of 96 % in 6 h. The specific rate constants calculated from the corresponding kinetic plots were among the highest found for polymer-incarcerated AuNPs. Similar values in terms of reactivity and selectivity were found in the oxidation of primary alcohols, such as cinnamyl alcohol and 2-thiophenemethanol, and secondary alcohols, such as indanol and  $\alpha$ -tetralol. The remarkable catalytic properties of this system were attributed to the formation, under these reaction conditions, of the nanoporous  $\epsilon$  crystalline form of syndiotactic polystyrene, which ensures facile and selective accessibility for the substrates to the gold catalyst incarcerated in the polymer matrix. Moreover, the polymeric crystalline domains produced reversible physical cross-links that resulted in reduced gold leaching and also allowed the recovery and reuse of the catalyst. A comparison of catalytic performance between AuNPs and annealed AuNPs suggested that multiple twinned defective nanoparticles of about 9 nm in diameter constituted the active catalyst in these oxidation reactions.



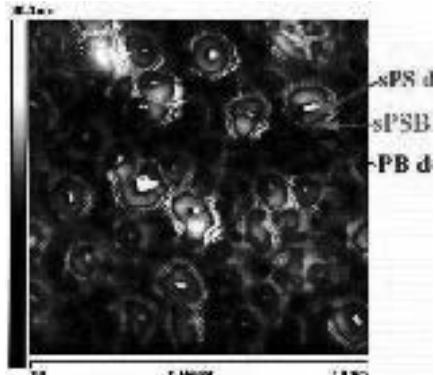
**A1 Article: Crystalline Syndiotactic Polystyrene as Reinforcing Agent of *cis*-1,4-Polybutadiene Rubber**

Antonio Buonerba, Cinzia Cuomo, Vito Speranza and Alfonso Grassi\*

*Macromolecules*, **2010**, *43*, 367-374

DOI: 10.1021/ma901859e

*Abstract:* Syndiotactic polystyrene (sPS), a thermoplastic polymer characterized by high crystallinity, good chemical resistance and high modulus, has been successfully tested as a reinforcing agent for *cis*-1,4-polybutadiene (PB) rubber. Blends of sPS and PB have been *in situ* synthesized using a multistep polymerization process catalyzed by monocyclopentadienyl titanium compounds activated with MAO. This procedure assures an intimate mixing of the components and homogeneous dispersion of the sPS particles having dimension from few hundreds of nanometers to micrometers. The analysis of the mechanical properties of the sPS–PB blends obtained using this process showed enhanced Young's modulus, toughness,  $\sigma_{\text{break}}$  and  $\epsilon_{\text{break}}$ : these properties were found to be 1 order of magnitude higher than those of PB and comparable to those of PB charged with inorganic filler as carbon black or silica. A multiblock copolymer (sPSB) comprising segments of sPS and PB was successfully *in situ* synthesized with the sPS and PB homopolymers and found to be an active compatibilizer of these blends producing a novel semicrystalline phase at the interphase between the sPS particles and the PB matrix.



### **3.3. ARTICOLI SCIENTIFICI ATTUALMENTE PROPOSTI PER PUBBLICAZIONE**

**UR1 Article: Highly Efficient Synthesis of Aromatic Ketimines via Hydroamination of Phenylacetylenes with Anilines Promoted by Gold Nanoparticles Embedded in Nanoporous Polymer Matrix**

Antonella Dentoni Litta, Antonio Buonerba, Alberto Casu, Andrea Falqui and Alfonso Grassi\*

*Under peer-review.*

*Abstract:* The solventless synthesis of aromatic ketimines via hydroamination of phenylacetylenes with anilines has been accomplished in high yields and with excellent regio- and stereo-selectivity using gold nanoparticles (**AuNPs**) embedded in syndiotactic polystyrene-*cis*-1,4-polybutadiene (**sPSB**) multiblock copolymer matrix. The performance of AuNPs-sPSB exceeds those of the commercial gold catalysts AuNPs-TiO<sub>2</sub>, AuNPs-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, AuNPs-ZnO and AuNPs-CB as a result of the high affinity and permeability of the aromatic reactants with the semicrystalline and nanoporous polystyrenic support. Moreover, the polymer matrix allows excellent thermal stability and recyclability of the gold catalyst. The role of electron-withdrawing and electondonating substituents onto the aromatic group of anilines and phenylacetylenes was also investigated; in all case high activity and selectivity toward the thermodynamic favoured *E* stereoisomer was observed. Kinetic investigation of the reaction of phenylacetylene with aniline and aniline-*N,N*-d<sub>2</sub> allowed calculating the activation energy barrier of  $46 \pm 9 \text{ kJ mol}^{-1}$  vs of  $20 \pm 1 \text{ kJ mol}^{-1}$  respectively, highlighting an inverse equilibrium isotopic effect; affording insights on the reaction mechanism.



### **3.4. ARTICOLI SCIENTIFICI (PUBBLICATI IN RIVISTE CON ISSN OR ISBN)**

#### **P3 Use of Waste Materials for Biodiesel Production**

Rosa Vitiello, Antonio Buonerba, Riccardo Tesser, Martino Di Serio,\* Alfonso Grassi, Elio Santacesaria

*DGMK Tagungsbericht, 2012, 3, 49-54*

ISSN: 14339013

*Abstract:* Waste raw materials obtained by several sources of both food and agro industries could be considered for biofuel production. In the last years, this topic has growing in interest. At this purpose, our research, has been focused on the development of new technologies to obtain biodiesel from the mentioned wastes feedstock. In particular from oleins, that are mixtures of free fatty acids (FFAs) and triglycerides. Therefore, we are studying the way to produce biodiesel in two steps: an esterification reaction of FFAs with glycerol and a transesterification with methanol of the whole mixture. The esterification of FFAs with glycerol has the advantage of using a relatively high temperature favouring the stripping of water formed during the esterification. In this way esterification equilibrium is shifted to the right. Then, the mixture of mono-, di- and triglycerides, obtained by esterification with glycerol, can be submitted to transesterification with methanol, in the usual way, to produce biodiesel. Catalysts promoting esterification, normally, are mineral acids or heterogeneous Bronsted acid catalysts. At this purpose, the classical sulphonated polystyrene acid resins cannot be used at temperature greater than 120°C. Therefore, a new class of sulfonated polymers, with enhanced temperature resistance, has been developed by selective and quantitative sulfonation of olefinic butadiene units in multiblock copolymers syndiotactic polystyrene-*co*-1,4-*cis*-polybutadiene. This catalytic system has been successfully tested in the above mentioned esterification reaction and compared to classic commercial strong acid catalysts like Amberlyst®, Nafion® and sulfuric acid.

#### **P2 Microwave Treatment of Tuff-Stones. Structural Analysis**

Bruno Bisceglia, Elvira Avallone, Antonio Buonerba, Emilia Caliendo, Francesco Chiadini, Alfonso Grassi, Loredana Incarnato, Antonio Scaglione and Luigi Guerriero

*XIX RiNEm, 2011, 653-656*

ISBN: 978-88-907599-0-1

*Abstract:* Non destructive and non invasive techniques are irreplaceable in order to preserve and to restore cultural heritage objects in its structure and shape. Microwave (MW) non invasive disinfection methods allow to intervene on the heritage goods with no alteration of the state of preservation. It is important to demonstrate the MW treatment does not alter the structure of the goods, since this can influence its physical, chemical and mechanical properties. Aim of this work is to investigate about alterations of the structure of tuff-stones after MW disinfection. The effects have been investigated by several techniques, such as X-ray diffraction, infrared spectroscopy and thermogravimetric analysis. The results show that the structure is not much influenced by MW treatment.

#### **P1 Morphological Control And Applications Of Stereoregular Semicrystalline Multiblock Copolymers Of Styrene And Butadiene**

Alfonso Grassi,\* Antonio Buonerba, Cinzia Cuomo and Francesco Pastore

*Polymer Preprints, 2010, 51, 169*

ISSN: 0032-3934

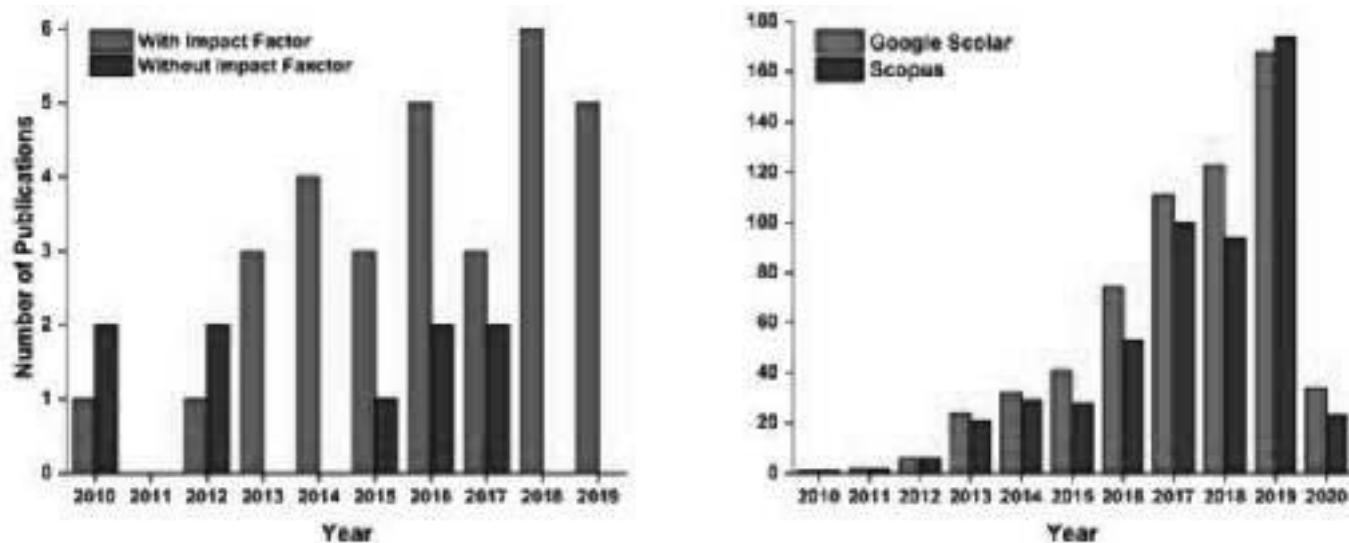
*Abstract:* Styrene-butadiene multi-block copolymers (sPS-B) comprising cryst. segments of syndiotactic polystyrene (sPS) and of cis-1,4-polybutadiene (PB) have been obtained with tunable block lengths using monocyclopentadienyl titanium compds. activated with MAO. AFM images of spin coated films from

chloroform solns. of sPS-B showed well defined morphologies (spheres, lamellae) at variance of the monomer block lengths and copolymer compn. Samples of sPS-B were successfully tested as active compatibilizer of blends of sPS with PB. Remarkable mech. properties were found when blends were in situ synthesized using a multistep polymn. process producing nano and micro particles of sPS homogeneously dispersed in a PB and compatibilized with sPS-B.

### **3.5. PARAMETRI BIBLIOMETRICI**

**Tabella 1.** Principali parametri bibliometrici

	<b>Parametro</b>	<b>Valore</b>
Pubblicazioni	Numero Pubblicazioni (Np)	36
	Numero Pubblicazioni medio annuale (Npm)	3.78
	Numero Pubblicazioni Normalizzato età acc. (Npn = Np*10/EA)	37.8
Impact factor	Impact factor totale (I.F.)	152.13
	Impact factor medio (I.F.m)	4.90
	Impact factor normalizzato età acc. (I.F.n = I.F*10/EA)	169.02
Citazioni	Numero citazioni Totali (Nc)	621
	Numero citazioni medio per pubblicazione (Ncm)	20
	Numero citazioni normalizzato età acc. (Ncn = Nc*10/EA)	690
Indici	H-index totale	14
	H-index dal 2015	14
	i10-index	20
Contributi come primo autore o corrispondente	N. pubblicazioni come primo autore	13
	% pubblicazioni come primo autore	40.6
	N. pubblicazioni come autore corrispondente	9
	% pubblicazioni come autore corrispondente	28



**Figura 1.** Numero di pubblicazioni e numero di citazioni in funzione dell'anno (aggiornato al 24-02-2020).

**Tabella 2.** Numero di citazioni di pubblicazioni su riviste con Impact Factor

Pubblicazione	Citazioni <sup>a</sup>	
	Scopus	Google Scholar
Buonerba, A.; De Nisi, A.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C.; Vagin, S.; Rieger, B. Novel iron(III) catalyst for the efficient and selective coupling of carbon dioxide and epoxides to form cyclic carbonates. <i>Catal. Sci. Technol.</i> 2015, 5 (1), 118-123 DOI: 10.1039/C4CY01187B.	80	95
Buonerba, A.; Cuomo, C.; Ortega Sánchez, S.; Canton, P.; Grassi, A. Gold Nanoparticles Incarcerated in Nanoporous Syndiotactic Polystyrene Matrices as New and Efficient Catalysts for Alcohol Oxidations. <i>Chem. Eur. J.</i> 2012, 18 (2), 709-715; DOI: 10.1002/chem.201101034.	60	74
Della Monica, F.; Vummaleti, S. V. C.; Buonerba, A.; Nisi, A. D.; Monari, M.; Milione, S.; Grassi, A.; Cavallo, L.; Capacchione, C. Coupling of Carbon Dioxide with Epoxides Efficiently Catalyzed by Thioether-Triphenolate Bimetallic Iron(III) Complexes: Catalyst Structure–Reactivity Relationship and Mechanistic DFT Study. <i>Adv. Synth. Catal.</i> 2016, 358 (20), 3231-3243; DOI: 10.1002/adsc.201600621.	39	42
Noschese, A.; Buonerba, A.; Canton, P.; Milione, S.; Capacchione, C.; Grassi, A. Highly efficient and selective reduction of nitroarenes into anilines catalyzed by gold nanoparticles incarcerated in a nanoporous polymer matrix: Role of the polymeric support and insight into the reaction mechanism. <i>J. Catal.</i> 2016, 340, 30-40; DOI: 10.1016/j.jcat.2016.05.005.	35	40
Buonerba, A.; Cuomo, C.; Speranza, V.; Grassi, A. Crystalline Syndiotactic Polystyrene as Reinforcing Agent of cis-1,4-Polybutadiene Rubber. <i>Macromolecules</i> 2010, 43 (1), 367-374; DOI: 10.1021/ma901859e.	32	35
Buonerba, A.; Noschese, A.; Grassi, A. Highly Efficient Direct Aerobic Oxidative Esterification of Cinnamyl Alcohol with Alkyl Alcohols Catalysed by Gold Nanoparticles Incarcerated in a Nanoporous Polymer Matrix: A Tool for Investigating the Role of the Polymer Host. <i>Chem. Eur. J.</i> 2014, 20 (18), 5478-5486; DOI: 10.1002/chem.201303880.	26	32
Buonerba, A.; Speranza, V.; Grassi, A. Novel Synthetic Strategy for the Sulfonation of Polybutadiene and Styrene–Butadiene Copolymers. <i>Macromolecules</i> 2013, 46 (3), 778-784 DOI: 10.1021/ma301972m.	23	32
Buonerba, A.; Fienga, M.; Milione, S.; Cuomo, C.; Grassi, A.; Proto, A.; Capacchione, C. Binary Copolymerization of p-Methylstyrene with Butadiene and Isoprene Catalyzed by Titanium Compounds Showing Different Stereoselectivity. <i>Macromolecules</i> 2013, 46 (21), 8449-8457; DOI: 10.1021/ma401621v.	24	25
Della Monica, F.; Luciano, E.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C. Poly(lactide-co-ε-caprolactone) copolymers prepared using bis-	22	24

thioetherphenolate group 4 metal complexes: synthesis, characterization and morphology. *RSC Adv.* 2014, 4 (93), 51262-51267; DOI: 10.1039/C4RA10255J.

Della Monica, F.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Milione, S. Glycidol: an Hydroxyl-Containing Epoxide Playing the Double Role of Substrate and Catalyst for CO <sub>2</sub> Cycloaddition Reactions. <i>ChemSusChem</i> 2016, 9 (24), 3457-3464 DOI: 10.1002/cssc.201601154.	20	20
Lapenta, R.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C. Stereorigid OSSO-Type Group 4 Metal Complexes in the Ring-Opening Polymerization of <i>rac</i> -Lactide. <i>Inorg. Chem.</i> 2017, 56 (6), 3447-3458 DOI: 10.1021/acs.inorgchem.6b02987.	16	19
Capacchione, C.; De Roma, A.; Buonerba, A.; Speranza, V.; Milione, S.; Grassi, A. Syndiotactic Polystyrene-block-Poly(methyl methacrylate) Copolymer via Click Chemistry. <i>Macromol. Chem. Phys.</i> 2013, 214 (17), 1990-1997 DOI: 10.1002/macp.201300237.	14	16
Della Monica, F.; Buonerba, A.; Capacchione, C., Homogeneous Iron Catalysts in the Reaction of Epoxides with Carbon Dioxide. <i>Adv. Synth. Catal.</i> 2019, 361 (2), 265-282	15	14
Buonerba, A.; Della Monica, F.; De Nisi, A.; Luciano, E.; Milione, S.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Rieger, B. Thioether-triphenolate bimetallic iron(III) complexes as robust and highly efficient catalysts for cycloaddition of carbon dioxide to epoxides. <i>Faraday Discuss.</i> 2015, 183 (0), 83-95 DOI: 10.1039/C5FD00070J.	12	14
Buonerba, A.; Impemba, S.; Dentoni Litta, A.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A. Aerobic Oxidation and Oxidative Esterification of 5-Hydroxymethylfurfural by Gold Nanoparticles Supported on Nanoporous Polymer Host Matrix. <i>ChemSusChem</i> 2018, 11 (18), 3139-3149.	13	13
Galdi, N.; Buonerba, A.; Oliva, P.; Oliva, L. Nanostructured ethylene-styrene copolymers. <i>Polym. Chem.</i> 2014, 5 (8), 3045-3052 DOI: 10.1039/C3PY01703F.	8	13
Buonerba, A.; Speranza, V.; Canton, P.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A. Novel nanostructured semicrystalline ionomers by chemoselective sulfonation of multiblock copolymers of syndiotactic polystyrene with polybutadiene. <i>RSC Adv.</i> 2014, 4 (104), 60158-60167 DOI: 10.1039/C4RA13253J.	9	11
Naddeo, M.; Buonerba, A.; Luciano, E.; Grassi, A.; Proto, A.; Capacchione, C. Stereoselective polymerization of biosourced terpenes $\beta$ -myrcene and $\beta$ -ocimene and their copolymerization with styrene promoted by titanium catalysts. <i>Polymer</i> 2017, 131 (Supplement C), 151-159; DOI: 10.1016/j.polymer.2017.10.028.	9	10
Galdi, N.; Buonerba, A.; Oliva, L. Olefin-Styrene Copolymers. <i>Polymers</i> 2016, 8 (11), 405 DOI: 10.3390/polym8110405.	8	10

Della Monica, F.; Maity, B.; Pehl, T.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Grassi, A.; Rieger, B.; Cavallo, L.; Capacchione, C. [OSO]-Type Iron(III) Complexes for the Low-Pressure Reaction of Carbon Dioxide with Epoxides: Catalytic Activity, Reaction Kinetics, and Computational Study. <i>ACS Catal.</i> 2018, 8, 6882-6893 DOI: 10.1021/acscatal.8b01695.	21	8
Luciano, E.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C. Thioetherphenolate group 4 metal complexes in the ring opening polymerization of rac- $\beta$ -Butyrolactone. <i>J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem.</i> 2016, 54 (19), 3132-3139 DOI: 10.1002/pola.28198.	5	8
Della Monica, F.; Buonerba, A.; Paradiso, V.; Milione, S.; Grassi, A.; Capacchione, C., [OSO]-Type Fe(III) Metallate as Single-Component Catalyst for the CO <sub>2</sub> Cycloaddition to Epoxides. <i>Adv. Synth. Catal.</i> 2019, 361 (2), 283-288.	9	7
Lapenta, R.; De Simone, N. A.; Buonerba, A.; Talotta, C.; Gaeta, C.; Neri, P.; Grassi, A.; Milione, S. Dinuclear zirconium complex bearing a 1,5-bridged-calix[8]arene ligand as an effective catalyst for the synthesis of macrolactones. <i>Catal. Sci. Technol.</i> 2018, 8 (10), 2716-2727 DOI: 10.1039/C7CY02537H.	6	6
Luciano, E.; Della Monica, F.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Milione, S. Polymerization of ethylene and propylene promoted by group 4 metal complexes bearing thioetherphenolate ligands. <i>Polym. Chem.</i> 2015, 6 (25), 4657-4668 DOI: 10.1039/C5PY00488H.	4	6
Buonerba, A.; Speranza, V.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A. Improvement of tensile properties, self-healing and recycle of thermoset styrene/2-vinylfuran copolymers via thermal triggered rearrangement of covalent crosslink. <i>Eur. Polym. J.</i> 2018, 99, 368-377 DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2017.12.040.	4	6
Buonerba, A.; Lapenta, R.; Ortega Sánchez, S.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A. A Comprehensive Depiction of the Furan-Maleimide Coupling via Kinetic and Thermodynamic Investigations of the Diels-Alder Reaction of Poly(styrene-co-2-vinylfuran) with Maleimides. <i>ChemistrySelect</i> 2017, 2 (4), 1605-1612 DOI: 10.1002/slct.201602071.	4	5
Vitiello, R.; Buonerba, A.; Tesser, R.; Di Serio, M.; Grassi, A.; Santacesaria, E.; Use of waste materials for biodiesel production, DGMK Tagungsbericht, 2012; 49-54	5	4
Della Monica, F.; Leone, M.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C., CO <sub>2</sub> cycloaddition to epoxides promoted by bis-thioether-phenolate Fe(II) and Fe(III) complexes. <i>Mol. Catal.</i> 2018, 460, 46-52.	5	4
Lapenta, R.; Buonerba, A.; Luciano, E.; Della Monica, F.; De Nisi, A.; Monari, M.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Milione, S., Phenylene-Bridged OSO-Type Titanium Complexes in the Polymerization of Ethylene and Propylene. <i>ACS Omega</i> 2018, 3 (9), 11608-11616	1	1
La Manna, P.; Soriente, A.; De Rosa, M.; Buonerba, A.; Talotta, C.; Gaeta, C.; Neri, P., Green, Mild, and Efficient Friedel-Crafts Benzylation of Scarcely	1	1

Reactive Arenes and Heteroarenes under On-Water Conditions. *ChemSusChem*  
2019, 12 (8), 1673-1683.

Lamparelli, D. H.; Speranza, V.; Camurati, I.; Buonerba, A.; Oliva, L., Synthesis and Characterization of Syndiotactic Polystyrene-Polyethylene Block Copolymer. 1 1  
*Polymers* 2019, 11 (4), 698.

Buonerba, A.; Monica, F. D.; Speranza, V.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A., Thin-film nanostructure and polymer architecture in semicrystalline syndiotactic poly(p-methylstyrene)-(cis-1,4-polybutadiene) multiblock copolymers. *Polym. Int.* 2019, 68 (10), 1681-1687. 0 0

<sup>a</sup> Dati aggiornati in data 24 febbraio 2020.

**Tabella 3.** Impact Factor delle riviste scientifiche

Rivista Scientifica	Impact Factor 2018 <sup>a</sup>	N. di Articoli	Impact Factor X N. di Articoli
<i>ACS Catalysis</i>	12.221	1	12.221
<i>ACS Omega</i>	2.584	1	2.584
<i>Advanced Synthesis &amp; Catalysis</i>	5.451	3	16.353
<i>Catalysis Science &amp; Technology</i>	5.726	2	11.452
<i>Chemistry - A European Journal</i>	5.16	2	10.320
<i>ChemistrySelect</i>	1.716	1	1.716
<i>ChemSusChem</i>	7.804	3	23.412
<i>European Polymer Journal</i>	3.621	1	3.621
<i>Faraday Discussions</i>	3.712	1	3.712
<i>Inorganic Chemistry</i>	4.85	1	4.850
<i>Journal of Catalysis</i>	7.723	1	7.723
<i>Journal of Polymer Science, Part A: Polymer Chemistry</i>	2.588	1	2.588
<i>Macromolecular Chemistry and Physics</i>	2.616	1	2.616
<i>Macromolecules</i>	5.997	3	17.991
<i>Molecular Catalysis</i>	2.938	1	2.938
<i>Polymer</i>	3.771	1	3.771
<i>Polymer Chemistry</i>	4.760	2	9.520
<i>Polymer International</i>	2.433	1	2.433
<i>Polymers</i>	3.164	2	6.328
<i>RSC Advances</i>	3.049	2	6.098

<sup>a</sup> Impact factor 2018 ricavato da Web of Science (Journal Citation Reports).

### **3.5. BREVETTI.**

- P2 Sintesi di Polialchilsolfonati da Destinare alla Produzione di Ionomeri e Polielettroliti Mediante Solfonazione Selettiva di Polidiensi e Copolimeri dei Dieni Coniugati (Synthesis of Polyalkylsulphonates for Production of Ionomers and Polyelectrolytes by Selective Sulfonation of Polydienes and Copolymers of Conjugated Dienes)**

*Inventors:* Antonio Buonerba, Alfonso Grassi.

*Italian Patent*, ref. n.: SA2012A000007, Year: 05/2012.

*Assignee:* Università degli Studi di Salerno, Italy.

*Abstract:* This invention deals with a simple, fast and cheap and eco-sustainable two steps process which allows the selective functionalization of olefinic moieties of a polymer chain, located along, or as side, or end groups, which are converted to alkylsulfonic group. Said process results in a formal addition of a sulfonic group and hydrogen atom to carbon-carbon double bonds. In the first reaction of said process a thioacid or 380 dithioacid is selectively added to the carbon-carbon double bonds located along, or in the side groups or in the end groups of the polymer chain, leaving not reacted (not sulfonated) other functional groups, typically aromatic rings of other monomeric units, determining the formation of thioacetylated polymers comprising thioester or dithioester moieties. Said addition reaction can be activated by thermo- or photo 385 sensitizers or radical initiators followed by irradiation with UV light of appropriate wavelengths. In the second reaction the thioester and dithioester moieties are oxidized with peracids or other oxidants to yield the corresponding polyalkylsulfonates.

- P1 Mescole di *cis*-1,4-Polibutadiene Rinforzate con Micro e Nanoparticelle di Polistirene Sindiotattico Cristallino Prodotte Mediante un Singolo Processo Catalitico a Stadi (Blends of *cis*-1,4-Polybutadiene Reinforced with Micro and Nanoparticles of Crystalline Syndiotactic Polystyrene Produced by a Single Catalytic Process In Stages)**

*Inventors:* Alfonso Grassi, Cinzia Cuomo, Antonio Buonerba.

*Italian Patent*, ref. n.: SA2009A000013, Year: 2009.

*Assignee:* Università degli Studi di Salerno, Italy.

*Abstract:* La presente invenzione riguarda un processo catalitico che permette di sintetizzare mescole di *cis*-1,4-polibutadiene rinforzate con particelle di polistirene sindiotattico semicristallino di dimensioni micrometriche e nanometriche omogeneamente disperse nella matrice polimerica. Tale processo prevede la polimerizzazione sequenziale dello stirene e di 1,3-butadiene condotta in un singolo reattore in presenza di un catalizzatore organometallico di un metallo di transizione o un lantanoide attivato con un composto di un metallo dei gruppi principali avente proprietà di acido di Lewis o Brønsted.

Tra lo stadio di polimerizzazione dello stirene e di 1,3-butadiene può essere introdotto un terzo stadio che permette di copolimerizzare, nello stesso reattore e nelle stesse condizioni di reazione, lo stirene con un monomero A per formare un copolimero multiblocco sPSA, in cui segmenti di polistirene sindiotattico sono separati da un'unità o da segmenti polimerici del monomero A. Questo terzo componente della mescola funge da compatibilizzante di *cis*-1,4-polibutadiene e polistirene sindiotattico, riduce la dimensione finale delle particelle di polistirene sindiotattico, modula la cristallinità del polistirene sindiotattico, favorisce l'inclusione della matrice gommosa all'interno delle particelle di termoplastico utilizzato come rinforzante e permette, infine, una reticolazione di tipo fisico o chimico tra i diversi componenti della mescola.

Le mescole risultanti dal processo oggetto della presente invenzione presentano proprietà meccaniche (modulo di Young, tenacità, sforzo a rottura ed elongazione a rottura) significativamente superiori a quelle di *cis*-1,4-polibutadiene ottenuto con la stessa procedura. Tali proprietà meccaniche sono facilmente modulabili variando la composizione della mescola, i tempi di reticolazione o vulcanizzazione, il peso molecolare medio dei componenti e l'indice di polidispersità dei prodotti polimerici. Queste caratteristiche sono a loro volta facilmente definite dalle concentrazioni relative dei monomeri in alimentazione e dai tempi e dalle temperature di polimerizzazione.

Costituisce inoltre parte della presente invenzione il ruolo del polistirene sindiotattico semicristallino quale agente rinforzante di elastomeri polidienici prodotti secondo la procedura sopra descritta.

### **3.6. STRUTTURE MOLECOLARI RISOLTE MEDIANTE DIFFRAZIONE DEI RAGGI-X, DEPOSITATE IN CAMBRIDGE CRYSTALLOGRAPHIC DATA CENTRE (CCDC).**

**C3 (2,2'-[benzene-1,2-diylbis(sulfanediylmethanediyl)]bis[4,6-bis(2-phenylpropan-2-yl)phenolateo])-bis(2-methylpropan-2-olato)-Zirconium toluene solvate**

Rosita Lapenta, Antonio Buonerba, Assunta De Nisi, Magda Monari, Alfonso Grassi, Stefano Milione, Carmine Capacchione

CCDC 1517664: Experimental Crystal Structure Determination, **2017**

DOI: [10.5517/ccdc.csd.cc1my7xq](https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1my7xq)

**C2 2-((2-((2-hydroxy-3,5-bis(2-phenylpropan-2-yl)benzyl)sulfanyl)phenyl)sulfanyl)methyl)-4,6-bis(2-phenylpropan-2-yl)phenol**

Rosita Lapenta, Antonio Buonerba, Assunta De Nisi, Magda Monari, Alfonso Grassi, Stefano Milione, Carmine Capacchione

CCDC 1517665: Experimental Crystal Structure Determination, **2017**

DOI: [10.5517/ccdc.csd.cc1my7yr](https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1my7yr)

**C1 Bis( $\mu$ -(4-t-butyl-2-((2-oxy-3,5-dimethylphenyl)sulfanyl)methyl)-6-((2-oxy-3,5-dimethylphenyl)sulfanyl)methyl)phenolato)-di-Iron(III)**

Francesco della Monica, Sai V. C. Vummaleti, Antonio Buonerba, Assunta De Nisi, Magda Monari, Stefano Milione, Alfonso Grassi, Luigi Cavallo, Carmine Capacchione

CCDC 1477580: Experimental Crystal Structure Determination, **2016**

DOI: [10.5517/ccdc.csd.cc1lljwl](https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1lljwl)

### **3.7. CAPITOLI IN LIBRO**

#### **B2 Bio-sourced polyolefins**

Alfonso Grassi, Antonio Buonerba and Sheila Ortega Sánchez  
*in BIOREFINERIES AN INTRODUCTION*

Editors: Michele Aresta, Angela Dibenedetto and Frank Dumeignil

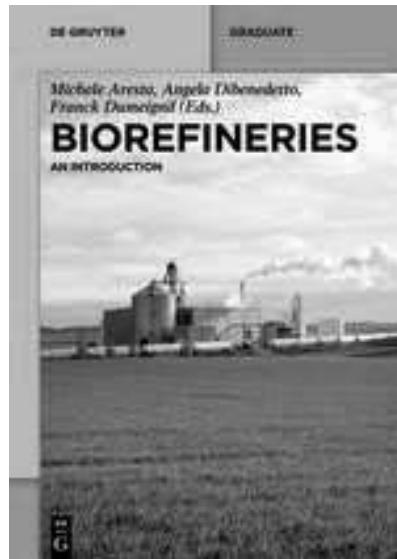
De Gruyter, 2015, Chapter 7, pp. 165-196

DOI: 10.1515/9783110331585-011

ISBN: 9783110331585

URL: <https://www.degruyter.com/viewbooktoc/product/210639>

*Abstract:* In the last 5 years (2010–2015) the worldwide annual production of plastics surpassed the figure of 300 Mt; more than 80% of the plastic market deals with the production, transformation and end use of polyolefins. Plastics are a fundamental component of everyday life providing cost effective, light and disposable tools which find application in different fields. The increased concerns about the depletion of fossil reserves, the greenhouse gas emissions and feedstock costs cause bio-derived polyolefins are emerging rapidly as valid alternative to the fossil fuel based counterpart. In this review the drop-in synthesis of conventional olefins is reviewed and the properties of some novel bioderived polyolefins are presented and discussed.



#### **B1 Trattamento a microonde di beni architettonici. Verifiche strutturali su campioni di tufo**

Bruno Bisceglia, Antonio Buonerba, Aurora Fondacaro, Alfonso Grassi and Luigi Guerriero

*in TECNOLOGIE INNOVATIVE PER IL TRATTAMENTO DI BENI CULTURALI - APPLICAZIONI DELLE ONDE ELETTROMAGNETICHE PER DIAGNOSI E CONSERVAZIONE*

Editor: Bruno Bisceglia,

Aracne Editrice, 2016, pp. 307-326

ISBN: 978-88-548-9369-6

*Abstract:* L'evoluzione della teoria del restauro ci ha mostrato l'importanza di conservare la materia antica nella sua autenticità, riconducendo ogni intervento sui beni architettonici ad un atto critico-conservativo. La necessità dunque di ricorrere a interventi di pulitura, ripristino, integrazione, per conservare il patrimonio culturale non può prescindere da uno studio attento della materia e dei fenomeni di degrado che la interessano. Non si può d'altra parte evitare di prestare attenzione alle tecniche in uso, all'impatto ambientale, ai costi e ai tempi di intervento, nonché alla sicurezza degli operatori. Per tale motivo, è importante che la ricerca nelle tecniche di conservazione della materia si orienti verso un approccio interdisciplinare che consenta il superamento dei limiti riscontrati in quelle tradizionali. Con tale premessa si dà avvio ad un lavoro di sperimentazione volto a "testare" gli effetti di una tecnica nuova nel restauro architettonico, ma già ampiamente utilizzata in altri settori: "il riscaldamento con microonde". L'applicazione di tale metodo ai beni architettonici, e nello specifico ai materiali lapidei, è possibile grazie al fatto che le microonde consentono un riscaldamento differenziale in funzione delle caratteristiche dielettriche dei materiali, pertanto risultano adatte alla disinfezione di forme biologiche infestanti perché surriscaldano le stesse, in quanto costituite prevalentemente da acqua. Di contro, però, è necessario assicurare che la materia "scaldata" non subisca alterazioni nella microstruttura, e quindi va sottoposta a una serie di indagini chimico-fisiche volte a stabilire se esistono degli effetti conseguenti a tale trattamento.



### **3.8. CONTRIBUTI IN CONGRESSI SCIENTIFICI**

- M48** (*Comunicazione orale*) Buonerba, A.; Lapenta, R.; Licasale, M.; Donniacuo, A.; Vezzoli, E.; Falqui, A.; Piacentini, R.; Grassi, C. Grassi, A.  
*Photothermal Therapy of Cancer Cells by Near Infrared Multiphoton Absorption and Quenching with Dansylated-Glutathione Coated Spherical Gold Nanoparticles Aggregates*, Simposio “I Chimici per le Biotecnologie”, Gruppo Interdivisionale di Biotecnologie, Società Chimica Italiana (SCI),; Napoli, Italia, 13-14 febbraio **2020**.
- M47** La Manna, P.; Soriente, A.; De Rosa, M.; Buonerba, A.; Talotta, C.; Gaeta, C.; Neri, P.  
*Friedel-Crafts Benzylation of Arenes and Heteroarenes Promoted by C-Undecyl-Resorcin[4]arene Under On Water Conditions*, XXXIX Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Organica della Società Chimica Italiana, Torino, Italia, 8-12 September **2019**.
- M46** (*Comunicazione orale*) Buonerba, A.; Lapenta, R.; Piacentini, R.; Licasale, M.; Donniacuo, A.; Vezzoli, E.; Falqui, A.; Milione, S.; Capacchione, C.; Grassi, C., *Grassi, A.*  
*Glutathione coated spherical gold nanoparticles aggregates as efficient heater in photothermal therapy*, XLVI Congresso Nazionale di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana, Bologna, Italy, 10-13 Settembre, **2018**.
- M45** Capacchione, C.; Maity, B.; Pehl, T.; Buonerba, A. De Nisi, A. Monari, M. Grassi, A. Rieger, B. Cavallo, L. Della Monica, F.  
*Low-Pressure Reaction of Carbon Dioxide with Epoxides Promoted by [OSO<sub>2</sub>]<sub>n</sub>-Type Iron(III) Complexes*  
XLVI Congresso Nazionale di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana, Bologna, Italy, 10-13 Settembre, **2018**.
- M44** (*Comunicazione orale*) Buonerba, A.; Capacchione, C.; Milione, S.; Impemba, S.; Dentoni Litta, A.; Grassi, A.  
*Organic transformations catalyzed by gold nanoparticles embedded in a porous polymer host matrix*, International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC18, Sydney, Australia, 22-25 Luglio, **2018**.
- M43** Dentoni Litta, A.; Buonerba, A.; Grassi, A.  
*Hydroamination reaction of alkynes catalysed by gold nanoparticles supported onto a porous host polymer matrix*, 2<sup>nd</sup> PoMoS, 2<sup>nd</sup> Meeting on Porous Molecular Solids, Vietri sul Mare, Italy 6-8 Giugno, **2018**.
- M42** Vitiello, R.; Turco, R.; Russo, V.; Tesser, R.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Di Serio, M.  
*Sustainable biochemicals production by esterification reaction using a sulfonic resin as catalyst*, 13<sup>th</sup> European Congress on Catalysis EUROPACAT 2017, Firenze, 27-31 Agosto **2017**.

- M41** Tesser, R.; Vitiello, R.; Turco, R.; Russo, V.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Di Serio, M.  
*Sustainable biochemicals production by esterification reaction using heterogeneous catalysts*,  
XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Paestum, Italy, 10-14 Settembre  
**2017.**
- M40** Lapenta, R.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C.  
*Stereorigid osso-type group 4 metal complexes in the polymerization of olefins and polar monomers*,  
XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Paestum, Italy, 10-14 settembre  
**2017.**
- M39** Lapenta, R.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C.  
*Stereorigid osso-type group 4 metal complexes in the polymerization of olefins and polar monomers*,  
XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Paestum, Italy, **2017.**
- M38** Lamparelli, D.H.; Buonerba, A.; Galdi, N.; Oliva, L.  
*Diblock copolymer ethylene-syndiotactic styrene*,  
XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Paestum, Italy, 10-14 settembre  
**2017.**
- M37** Impemba, S.; Buonerba, A.; Milione, S.; Capacchione, C.; Grassi, A.  
*Oxidation of 5-hydroxymethylfurfural catalyzed by gold nanoparticles*,  
3<sup>rd</sup> Edition of NanomeetsBio@Nanomates, Salerno, Italy, 16 Febbraio, **2017.**
- M36** Della Monica, F.; Vummaleti, S.V.C.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Milione, S.; Grassi, A.; Cavallo, L.; Capacchione, C.  
*Complessi a base di Fe(III) con leganti di tipo osso per la reazione di accoppiamento del diossido di carbonio con gli epossidi*,  
5° Workshop Nazionale Gruppo Interdivisionale Di Green Chemistry Chimica Sostenibile, Roma, Italy, 16 giugno, **2017.**
- M35** Della Monica, F.; Vummaleti, S.V.C.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Milione, S.; Grassi, A.; Cavallo, L.; Capacchione, C.  
*Reaction of CO<sub>2</sub> with epoxides promoted by [OSO]-type Fe(III) complexes*,  
XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Paestum, Italy, 10-14 settembre  
**2017.**
- M34** Della Monica, F.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Milione, S.  
*Cycloaddition of co2 to glycidol: An hydroxyl containing epoxide playing the double role of substrate and catalyst*,  
3<sup>rd</sup> Edition of NanomeetsBio@Nanomates, Salerno, Italy, Febbraio 16, **2017;**
- M33** Capacchione, C.; Naddeo, M.; Luciano, E.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Proto, A. In *Biosourced polymers from stereoregular polymerization of monoterpenes in the presence of*

*homogeneous titanium catalysts*, XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Paestum, Italy, 10-14 Settembre, **2017**;

- M32** Capacchione, C.; Naddeo, M.; Luciano, E.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Proto, A.  
*Biosourced polymers from stereoregular polymerization of monoterpenes in the presence of homogeneous titanium catalysts*,  
XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Paestum, Italy, **2017**;
- M31** (*Poster*) Buonerba, A.; Monica, F.D.; Vummaleti, S.V.C.; De Nisi, A.; Monari, M.; Milione, S.; Grassi, A.; Cavallo, L.; Capacchione, C.  
*Selective production of cyclic organic carbonates from CO<sub>2</sub> and epoxides promoted by dinuclear iron(iii) complexes*,  
3<sup>rd</sup> Edition of NanomeetsBio@Nanomates, Salerno, Italy, 16 Febbraio, **2017**;
- M30** Vitiello, R.; Tesser, R.; Turco, R.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Di Serio, M.  
*Sustainable biolubricants production by esterification reaction*,  
6<sup>th</sup> EuCheMS Chemistry Congress, Seville, Spain, 11-15 Settembre, **2016**;
- M29** (*Comunicazione orale*) Buonerba, A.; Noschese, A.; Impemba, S.; Canton, P.; Milione, S.; Capacchione, C.; Grassi, A.  
*Gold nanoparticles supported by nanoporous crystalline polymer as highly active and selective catalyst for redox organic syntheses*,  
XLIV Congresso Nazionale di Chimica Inorganica, Padova, Italy, 14-17 settembre **2016**;
- M28** Grassi, A.; Buonerba, A.; Capacchione, C.; Milione, S.  
*Synthesis and applications of styrenic copolymers by metal catalyzed polymerization processes*,  
251<sup>st</sup> ACS National Meeting, San Diego, USA, 13-17 Marzo, **2016**;
- M27** Grassi, A.; Buonerba, A.; Capacchione, C.; Milione, S.  
*Thermoremendable styrenic polymers by controlled radical copolymerization of styrene with 2-vinylfuran*,  
6<sup>th</sup> International IUPAC Conference On Green Chemistry, Venezia, Italy, 4-8 Settembre, **2016**;
- M26** Della Monica, F.; Buonerba, A.; Milione, S.; Grassi, A.; Capacchione, C.  
*New [OSO]-type iron(III) complexes as efficient catalysts for the coupling of carbon dioxide with epoxides*,  
14<sup>th</sup> International Conference on Carbon Dioxide Utilization - ICCDU XIV, Sheffield, UK, 11-15 Settembre, **2016**;
- M25** Della Monica, F.; Buonerba, A.; Milione, S.; Capacchione, C.; Grassi, A.  
*Organocatalytic cycloaddition of co2 to glycidol: The dual role of substrate and catalyst played by a hydroxy-functionalized epoxide*,

6<sup>th</sup> International IUPAC Conference On Green Chemistry, Venezia, Italy, 4-8 Settembre, 2016;

- M24** Della Monica, F.; Buonerba, A.; Luciano, E.; Milione, S.; Grassi, A.; Capacchione, C.  
*Robust Iron(III) complexes for the selective production of COCs from CO<sub>2</sub> and epoxides,*  
14<sup>th</sup> International Conference on Carbon Dioxide Utilization - ICCDU XIV, Sheffield, UK,  
11-15 Settembre, 2016;
- M23** Della Monica, F.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Luciano, E.; Milione, S.; Grassi, A.; Capacchione, C.  
*Air stable dinuclear Iron(III) complexes as catalysts for the coupling of carbon dioxide with oxiranes,*  
XIII PhD Day, Bologna, Italia, 10-11 marzo, 2016;
- M22** Lapenta, R.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Milione, S.  
*Group 4 metal complexes bearing bis-thioetherphenolate ligands. Coordination chemistry and ring-opening polymerization catalysis,*  
4<sup>th</sup> Blue Sky Conference on Catalytic Olefin Polymerization, Sorrento, Italy, 27 giugno – 1 Luglio, 2016;
- M21** Buonerba, A.; Della Monica, F.; Nisi, A.D.; Monari, M.; Milione, S.; Grassi, A.; Capacchione, C.  
*New [OSO]-type Iron(III) complexes as efficient catalysts for the synthesis of polycarbonates and cyclic carbonates form carbon dioxide and oxiranes,*  
4<sup>th</sup> Blue Sky Conference on Catalytic Olefin Polymerization, Sorrento, Italy, 27 giugno - 1 Luglio, 2016;
- M20** Noschese, A.; Buonerba, A.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A.  
*Nitrobenzene reduction with AuNPs supported onto a polymeric matrix,*  
XLIII Congresso Nazionale di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana, Camerino, Italy, settembre 2015;
- M19** Buonerba, A.; Della Monica, F.; De Nisi, A.; Luciano, E.; Milione, S.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Rieger, B.  
*Thioether-Triphenolate Bimetallic Iron(III) Complexes as Robust and Highly Efficient Catalysts for Cycloaddition of Carbon Dioxide to Epoxides,*  
Faraday Discuss., Sheffield, UK, September 7-9, 2015;
- M18** Noschese, A.; Buonerba, A.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A.  
*Selective and efficient reduction of nitrobenzene to aniline catalyzed by AuNPs embedded in a nanoporous crystalline polymeric support,*  
XIX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Industriale della Società Chimica Italiana, Salerno, Italy, settembre 2015;

- M17** Grassi, A.; Buonerba, A.; Noschese, A. In *Organic transformations catalyzed by gold nanoparticles incarcerated in a nanoporous polymer matrix*, 250<sup>th</sup> ACS National Meeting & Exposition, Boston, MA, United States, 16-20 Agosto, **2015**;
- M16** Grassi, A.; Buonerba, A.; Capacchione, C.; Milione, S. *Synthesis and applications of styrenic copolymers; a 25 years long history at UniSA*, XIX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Industriale della Società Chimica Italiana, Salerno, Italy, settembre, **2015**;
- M15** Della Monica, F.; Buonerba, A.; Nisi, A.D.; Monari, M.; Luciano, E.; Milione, S.; Grassi, A.; Capacchione, C. *Dinuclear Iron(III) complexes containing thioether-triphenolate ligand: Exceptionally active catalysts for the coupling of carbon dioxide with epoxides for COCs production*, XIX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Industriale della Società Chimica Italiana, Salerno, Italia, settembre, **2015**;
- M14** Vitiello, R.; Buonerba, A.; Di Serio, M.; Grassi, A. *Catalytic processes in biorefinery*, XI PhD-Chem Day, Bari, Italy, Marzo, **2014**;
- M13** Milione, S.; Della Monica, F.; Luciano, E.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Capacchione, C. *Random copolymerization of cyclic esters promoted by bis-thioetherphenolate Group 4 metal complexes*, 5<sup>th</sup> EuCheMS Chemistry Congress, Istanbul, Turkey, Agosto, **2014**;
- M12** Grassi, A.; Noschese, A.; Ortega Sánchez, S.; Buonerba, A. *Organic transformations catalyzed by gold nanoparticles*, Co.G.I.C.O. 2014 XI Congresso del Gruppo Interdivisionale di Chimica Organometallica, Milan, Italy, luglio, **2014**;
- M11** De Nisi, A.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C.; Vagin, S.; Rieger, B. *Selective synthesis of cyclic carbonates from CO<sub>2</sub> and epoxides promoted by a highly effective Iron(III) catalyst*, XIV Sigma-Aldrich Young Chemists Symposium (SAYCS 2014), Riccione, Italy, **2014**;
- M10** Capacchione, C.; De Nisi, A.; Buonerba, A.; Milione, S.; Vagin, S.; Rieger, B.; Grassi, A. *Novel highly effective Iron(III) catalyst for the synthesis of cyclic carbonates from CO<sub>2</sub> and epoxides*, 5<sup>th</sup> EUCHEMS Chemistry Congress, Istanbul, Turkey, Agosto **2014**;
- M9** Capacchione, C.; De Nisi, A.; Buonerba, A.; Milione, S.; Vagin, S.; Rieger, B.; Grassi, A. *Novel highly effective Iron(III) catalyst for the synthesis of cyclic carbonates from CO<sub>2</sub> and epoxides*, Large-volume CO<sub>2</sub> Utilization: Enabling Technologies for Energy and Resource Efficiency, Lyon, France, Settembre, **2014**;

- M8** (*Comunicazione orale*) Buonerba, A.; Noschese, A.; Ortega Sánchez, S.; Grassi, A.  
*Ossidazione ed esterificazione ossidativa aerobica di alcoli catalizzata da nanoparticelle di oro incluse in matrici polimeriche nanoporose,*  
1° Workshop Nazionale Gruppo Interdivisionale di Green-Chemistry - Chimica Sostenibile, Bologna, Italy, luglio, **2013**;
- M7** (*Poster*) Buonerba, A.; Grassi, A.  
*Novel versatile route for the production of polyelectrolytes and ionomers with enhanced thermal stability and controlled morphology by sulfonation of polybutadiene and butadiene-styrene copolymers,*  
IUPAC 10<sup>th</sup> International Conference on Advanced Polymers via Macromolecular Engineering - APME, Durham, UK, Agosto, **2013**;
- M6** Grassi, A.; Buonerba, A.; Speranza, V.  
*Sulfonation of polybutadiene and butadiene-styrene copolymers as versatile route for the production of polyelectrolytes and ionomers with enhanced thermal stability and controlled morphology,*  
4<sup>th</sup> EuCheMS Chemistry Congress, Prague, Czech Republic, 26–30 Agosto, **2012**;
- M5** Bisceglia, B.; Avallone, E.; Buonerba, A.; Caliendo, E.; Chiadini, F.; Grassi, A.; Incarnato, L.; Scaglione, A.; Guerriero, L.  
*Microwave treatment of tuff-stones. Structural analysis,*  
Riunione Nazionale di Elettromagnetismo – XIX RiNEm, Rome, Italy, 10–14 Settembre **2012**;
- M4** Vitiello, R.; Buonerba, A.; Tesser, R.; Di Serio, M.; Grassi, A.; Carotenuto, G.; Mallardo, S.; Santacesaria, E.  
*Use of waste materials for biodiesel production,*  
XIX International Symposium on Alcohol Fuels - ISAF, Verona, Italy, 10–14 Ottobre **2011**;
- M3** (*Comunicazione orale*) Buonerba, A.; Vitiello, R.; Di Serio, M.; Grassi, A.; Santacesaria, E.  
*Synthesis and catalytic applications of novel thiolated and sulfonated polymers resulting by functionalization of multiblock syndiotactic polystyrene-co-1,4-cis-polybutadiene,*  
XXIV Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Lecce, Italy, 11–16 Settembre **2011**;
- M2** (*Comunicazione orale*) Buonerba, A.; Cuomo, C.; Ortega Sánchez, S.; Canton, P.; Grassi, A.  
*Controlled synthesis of gold nanoparticles incarcerated in syndiotactic polystyrene matrix,*  
XXXVIII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana, Trieste, Italy, 13–16 Settembre **2010**;
- M1** Grassi, A.; Buonerba, A.; Cuomo, C.; Pastore, F.

*Morphological control and applications of semicrystalline multiblock copolymers of styrene and butadiene,*

239<sup>th</sup> ACS National Meeting & Exposition, San Francisco, California, 21-25 Marzo, 2010;

### **3.9. PARTECIPAZIONE A PROGETTI DI RICERCA**

#### **Dal 11-09-2019 C.U.G.RI.**

**ad oggi**

Il dott. Antonio Buonerba è attualmente coinvolto in un progetto di ricerca, finanziato dal Consorzio inter-Universitario per la previsione e la prevenzione dei Grandi Rischi (C.U.G.RI.), avente come responsabile scientifico il Prof. Vincenzo Belgiorno e sede il Laboratorio di Ingegneria Sanitaria e Ambientale (Sanitary Environmental Engineering Division, SEED) del Dip. di Ingegneria Civile dell'Università degli Studi di Salerno. L'attività prevede il: “*Supporto alle attività di messa a punto di nuove metodiche analitiche per la determinazione di contaminanti in matrice liquida, solida e gassosa*” e lo svolgimento della: “*Complessa esecuzione operativa delle attività di ricerca e di monitoraggio ambientale in campo oggetto di accordo con l'Autorità Portuale del Proto di Salerno. In particolare, le attività prevedono il supporto alla caratterizzazione di contaminanti in matrici ambientali mediante la messa a punto di nuove metodiche analitiche, alla elaborazione statistica dei parametri di qualità ambientale, allo studio e confronto delle nuove metodiche analitiche proposte con le principali norme e normative di riferimento*”.

#### **Dal 16-03-2019 PRIN 2017**

**ad oggi**

Il Dr. Antonio Buonerba fa parte del progetto di ricerca dal titolo “CO<sub>2</sub> as only source of carbons for monomers and polymers: a step forwards circular economy. (CO<sub>2</sub> ONLY)”, avente coordinatore del progetto la Prof.ssa Siglinda Perathoner (Univ. Messina) e responsabile dell’unità di ricerca il Prof. Alfonso Grassi (Univ. Salerno).

#### **Dal 1-04-2016 Assegno di Ricerca**

**al 31-03-2019**

Il dott. Antonio Buonerba dall’1 aprile 2016 al 31 marzo 2019 è stato titolare di un Assegno di Ricerca, bandito dall’Università degli Studi di Salerno (Bando n. 5340/2015 al prot. n. 76580 del 21/12/2015), svolto presso il Dipartimento di Chimica e Biologia dell’Università degli Studi di Salerno, sotto la guida del Prof. Alfonso Grassi afferente allo stesso Dipartimento. Titolo del progetto: “*Nuovi Materiali Ibridi Inorganici-Organici, Sistemi Macromolecolari e Complessi Metallorganici per Applicazioni in Catalisi, Scienza dei Materiali e Biomedicina*”. Area Scientifica: 03 – Scienze Chimiche; Settore Scientifico Disciplinare: CHIM/03.

#### **Dal 01-01-2014 REBIOCHEM**

**al 31-12-2014**

Il dott. Antonio Buonerba è stato incaricato dal Dipartimento di Chimica e Biologia dell’Università degli Studi di Salerno, in qualità di Istituzione afferente al Consorzio Interuniversitario Reattività Chimica e Catalisi (CIRCC), per lo svolgimento di attività di ricerca industriale e sviluppo sperimentale nell’ambito del progetto: “REBIOCHEM - Biochemicals da biomassa: Integrazioni di bio-conversioni per la produzione e l’applicazione di biochemicals da biomasse da II generazione da fonti

“rinnovabili” (codice identificativo: CTN01 00063\_49393; avviso MIUR: Sviluppo e Potenziamento di Cluster Tecnologici Nazionali - Decreto Direttoriale prot. 257/Ric del 30 maggio 2012). Al progetto REBIOCHEM partecipano diverse Istituzioni pubbliche e private, tra le quali: Novamont, ENEA, Beaulieu Fibres International, Spiga Nord s.p.a., Mater-Biotech s.p.a, nonché il CIRCC a cui afferisce l’Università degli Studi di Salerno. Dettagliate informazioni riguardo al progetto REBIOCHEM si possono trovare al sito internet: <http://www.novamont.com/rebiochem>. Il dott. Antonio Buonerba ha svolto 1500 ore nell’ambito del suddetto progetto tra il 1 gennaio 2014 ed il 31 dicembre 2014 presso il suddetto Dipartimento sotto la responsabilità scientifica del Prof. Alfonso Grassi.

L’attività di ricerca è documentata dalle seguenti pubblicazioni scientifiche: 1) Buonerba, A.; Speranza, V.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A., Improvement of tensile properties, self-healing and recycle of thermoset styrene/2-vinylfuran copolymers via thermal triggered rearrangement of covalent crosslink. *Eur. Polym. J.* 2018, 99, 368-377; 2) Naddeo, M.; Buonerba, A.; Luciano, E.; Grassi, A.; Proto, A.; Capacchione, C., Stereoselective polymerization of biosourced terpenes  $\beta$ -myrcene and  $\beta$ -ocimene and their copolymerization with styrene promoted by titanium catalysts. *Polymer* 2017, 131 (Supplement C), 151-159; 3) Buonerba, A.; Lapenta, R.; Ortega Sánchez, S.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A., A Comprehensive Depiction of the Furan-Maleimide Coupling via Kinetic and Thermodynamic Investigations of the Diels-Alder Reaction of Poly(styrene-co-2-vinylfuran) with Maleimides. *ChemistrySelect* 2017, 2 (4), 1605-1612; 4) Noschese, A.; Buonerba, A.; Canton, P.; Milione, S.; Capacchione, C.; Grassi, A., Highly efficient and selective reduction of nitroarenes into anilines catalyzed by gold nanoparticles incarcerated in a nanoporous polymer matrix: Role of the polymeric support and insight into the reaction mechanism. *J. Catal.* 2016, 340, 30-40; 5) Della Monica, F.; Vummaleti, S. V. C.; Buonerba, A.; Nisi, A. D.; Monari, M.; Milione, S.; Grassi, A.; Cavallo, L.; Capacchione, C., Coupling of Carbon Dioxide with Epoxides Efficiently Catalyzed by Thioether-Triphenolate Bimetallic Iron(III) Complexes: Catalyst Structure-Reactivity Relationship and Mechanistic DFT Study. *Adv. Synth. Catal.* 2016, 358 (20), 3231-3243; 6) Della Monica, F.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Milione, S., Glycidol: an Hydroxyl-Containing Epoxide Playing the Double Role of Substrate and Catalyst for CO<sub>2</sub> Cycloaddition Reactions. *ChemSusChem* 2016, 9 (24), 3457-3464. 7) Buonerba, A.; Impemba, S.; Dentoni Litta, A.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A. Tuning of selectivity and activity in aerobic oxidation and oxidative esterification of 5-hydroxymethylfurfural by gold nanoparticles supported on nanoporous polymer host matrix. *ChemSusChem* 2018, article in press, DOI: 10.1002/cssc.201801560.

**Dal 01-10-2013    MASTRI  
al 30-09-2014**

Il dott. Antonio Buonerba dal 1 ottobre 2013 al 30 settembre 2014 è stato coinvolto nel progetto di ricerca: “MAteriali e STrutture Intelligenti”, MASTRI, Code 4-17-3, CUPB25B09000010007 nell’ambito del Progetto Operativo Regionale, Fondo europeo di sviluppo regionale POR-FESR.

L’attività di ricerca è documentata dalle seguenti pubblicazioni: 1) Buonerba, A.; Noschese, A.; Grassi, A. Highly efficient direct aerobic oxidative esterification of cinnamyl alcohol with alkyl alcohols catalysed by gold nanoparticles incarcerated in a nanoporous polymer matrix: A tool for investigating the role of the polymer host. *Chem. Eur. J.* 2014, 20, 5478-5486. 2) Buonerba, A.; Speranza, V.; Canton, P.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A. Novel nanostructured semicrystalline

ionomers by chemoselective sulfonation of multiblock copolymers of syndiotactic polystyrene with polybutadiene. *RSC Adv.* **2014**, *4*, 60158-60167. 3) Della Monica, F.; Luciano, E.; Buonerba, A.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C. Poly(lactide-co- $\epsilon$ -caprolactone) copolymers prepared using bis-thioetherphenolate group 4 metal complexes: Synthesis, characterization and morphology. *RSC Adv.* **2014**, *4*, 51262-51267. 4) Buonerba, A.; De Nisi, A.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C.; Vagin, S.; Rieger, B. Novel iron(III) catalyst for the efficient and selective coupling of carbon dioxide and epoxides to form cyclic carbonates. *Catal. Sci. Technol.* **2015**, *5*, 118-123. 5) Buonerba, A.; Della Monica, F.; De Nisi, A.; Luciano, E.; Milione, S.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Rieger, B. Thioether-triphenolate bimetallic iron(III) complexes as robust and highly efficient catalysts for cycloaddition of carbon dioxide to epoxides. *Faraday Discuss.* **2015**, *183*, 83-95.

**Dal 01-08-2012 al 31-07-2015 Assegno di Ricerca**

Il dott. Antonio Buonerba dal 1 agosto 2012 al 31 luglio 2013 è stato titolare di un Assegno di Ricerca, bandito dall'Università degli Studi di Salerno con protocollo N. 0018684 del 09/05/2012, svolto presso il Dipartimento di Chimica e Biologia dell'Università degli Studi di Salerno, sotto la guida del Prof. Alfonso Grassi afferente allo stesso Dipartimento. Titolo del progetto: "*Nuovi Processi Catalitici per la sintesi Ecosostenibile di Materiali Polimerici e Prodotti di Chimica Fine*". Settore Scientifico Disciplinare CHIM/03.

**Dal 12-03-2012 al 11-06-2012 Co.Co.Co.**

Il dott. Antonio Buonerba dal 12 marzo 2012 al 11 giugno 2012 è stato titolare di un Incarico di Lavoro Autonomo di Natura Coordinato e Continuativo, con responsabile scientifico il Prof. A. Grassi, bandito dall'Università degli Studi di Salerno con protocollo N. 3486 del 30/12/2011, svolto presso il Dipartimento di Chimica e Biologia dell'Università degli Studi di Salerno. Titolo del progetto: "*Sintesi controllata di nanoparticelle di oro - Sintesi di materiali ibridi – Applicazioni catalitiche di nanoparticelle di oro*".

**Dal 2010 2019 FARB**

Il dott. Antonio Buonerba, dal 2010 è incaricato dall'Università degli Studi di Salerno di svolgere attività di ricerca scientifica nell'ambito dei progetti annuali FARB (Fondo di ateneo per la ricerca di base).

### **3.10. COLLABORAZIONI SCIENTIFICHE ATTIVE.**

Collateralmente ai rapporti di collaborazione scientifica relativi ai progetti di ricerca sopra menzionati, il dott. Antonio Buonerba ha instaurato le seguenti relazioni di collaborazione:

**Dal 2018** Il dott. Antonio Buonerba sta collaborando con il Prof. **Andrea Falqui** e la Dr.ssa **Elena Vezzoli**, della King Abdullah University of Science and Technology (KAUST) in Arabia Saudita per lo studio dell'internalizzazione di nanoaparticelle di oro in cellule tumorali tramite microscopia a trasmissione elettronica. Il dott. Buonerba ha anticipato i risultati

ottenuti in questo studio alla comunità scientifica al Simposio “I Chimici Per Le Biotecnologie” tenutosi a Napoli in data 13-14 febbraio 2020 (comunicazione orale: *Photothermal Therapy of Cancer Cells by Near Infrared Multiphoton Absorption and Quenching with Dansylated-Glutathione Coated Spherical Gold Nanoparticles Aggregates*. A. Buonerba,\* R. Lapenta, M. Licasale, A. Donniacuo, E. Vezzoli, A. Falqui, R. Piacentini, Cl. Grassi and A. Grassi).

- Dal 2017** Dr. Antonio Buonerba has established a collaboration with Prof. **Placido Neri** and Prof. **Carmine Gaeta**, from University of Salerno, aimed at developing efficient catalytic systems based on metal complexes bearing calixarene ligands for polymerization of lactones deriving from natural sources. The following publication attests this collaboration: Lapenta, R.; De Simone, N. A.; Buonerba, A.; Talotta, C.; Gaeta, C.; Neri, P.; Grassi, A.; Milione, S., Dinuclear zirconium complex bearing a 1,5-bridged-calix[8]arene ligand as an effective catalyst for the synthesis of macrolactones. *Catal. Sci. Technol.* 2018, 8 (10), 2716-2727.
- Dal 2016** Dr. Antonio Buonerba is collaborating with Prof. **Magda Monari**, from University of Bologna) for the structural elucidation of metal complexes by means single crystal x-ray diffraction. The following publications attest this collaboration: 1) Della Monica, F.; Vummaleti, S. V. C.; Buonerba, A.; Nisi, A. D.; Monari, M.; Milione, S.; Grassi, A.; Cavallo, L.; Capacchione, C., Coupling of Carbon Dioxide with Epoxides Efficiently Catalyzed by Thioether-Triphenolate Bimetallic Iron(III) Complexes: Catalyst Structure-Reactivity Relationship and Mechanistic DFT Study. *Adv. Synth. Catal.* 2016, 358 (20), 3231-3243; 2) Lapenta, R.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C., Stereorigid OSSO-Type Group 4 Metal Complexes in the Ring-Opening Polymerization of rac-Lactide. *Inorg. Chem.* 2017, 56 (6), 3447-3458; 3) Della Monica, F.; Maity, B.; Pehl, T.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Grassi, A.; Rieger, B.; Cavallo, L.; Capacchione, C., [OSMO]-Type Iron(III) Complexes for the Low-Pressure Reaction of Carbon Dioxide with Epoxides: Catalytic Activity, Reaction Kinetics, and Computational Study. *ACS Catal.* 2018, 8, 6882-6893; 4) Lapenta, R.; Buonerba, A.; Luciano, E.; Della Monica, F.; De Nisi, A.; Monari, M.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Milione, S., Phenylene-Bridged OSSO-Type Titanium Complexes in the Polymerization of Ethylene and Propylene. *ACS Omega* 2018, 3 (9), 11608-11616.
- Dal 2015** Dr. Antonio Buonerba has established a collaboration with Prof. **Luigi Cavallo**, from KAUST Catalysis Center of King Abdullah University of Science and Technology in Saudi Arabia, in order to investigate via Density Functional Theory (DFT) computational analysis the mechanism of reaction of iron(III) complexes for the coupling reaction of carbon dioxide with epoxides. The following publications demonstrate this collaboration: 1) Della Monica, F.; Vummaleti, S. V. C.; Buonerba, A.; Nisi, A. D.; Monari, M.; Milione, S.; Grassi, A.; Cavallo, L.; Capacchione, C., Coupling of Carbon Dioxide with Epoxides Efficiently Catalyzed by Thioether-Triphenolate Bimetallic Iron(III) Complexes: Catalyst Structure-Reactivity Relationship and Mechanistic DFT Study. *Adv. Synth. Catal.* 2016, 358 (20), 3231-3243; 2) Della Monica, F.; Maity, B.; Pehl, T.; Buonerba, A.; De Nisi, A.; Monari, M.; Grassi, A.; Rieger, B.; Cavallo, L.; Capacchione, C., [OSMO]-Type Iron(III) Complexes for the Low-Pressure Reaction of Carbon Dioxide with Epoxides: Catalytic Activity, Reaction Kinetics, and Computational Study. *ACS Catal.* 2018, 8, 6882-6893
- Dal 2014** Il dott. Antonio Buonerba dal 2014 ha un’attiva collaborazione col Prof. **Claudio Grassi** ed il Prof. **Roberto Piacentini**, dell’Istituto di Fisiologia Umana dell’Università Cattolica del Sacro Cuore di Roma, volta allo sviluppo di nanoparticelle d’oro attive nella fotoablazione di cellule cancerogene. Il dott. Antonio Buonerba presenterà i risultati di

questa attività al XLVI Congresso Nazionale di Chimica Inorganica che si terrà in Bologna il prossimo settembre. (Comunicazione orale: Buonerba, A.; Lapenta, R.; Piacentini, R.; Licasale, M.; Donniacuo, A.; Vezzoli, E.; Falqui, A.; Milione, S.; Capacchione, C.; Grassi, C., *Grassi, A. Glutathione coated spherical gold nanoparticles aggregates as efficient heater in photothermal therapy*).

- Dal 2014** Il dott. Antonio Buonerba a partire dal 2014 ha intrapreso un'attività di collaborazione con il Prof. **Bernhard Rieger** dell'Università Tecnica di Monaco in Germania, volta allo sviluppo di catalizzatori basati su complessi del Ferro(III) altamente attivi e selettivi nel processo di accoppiamento di anidride carbonica ed epossidi. Questa collaborazione è testimoniata dalle seguenti pubblicazioni: 1) Buonerba, A.; De Nisi, A.; Grassi, A.; Milione, S.; Capacchione, C.; Vagin, S.; Rieger, B., Novel iron(iii) catalyst for the efficient and selective coupling of carbon dioxide and epoxides to form cyclic carbonates. *Catal. Sci. Technol.* 2015, 5 (1), 118-123; 2) Buonerba, A.; Della Monica, F.; De Nisi, A.; Luciano, E.; Milione, S.; Grassi, A.; Capacchione, C.; Rieger, B., Thioether-triphenolate bimetallic iron(III) complexes as robust and highly efficient catalysts for cycloaddition of carbon dioxide to epoxides. *Faraday Discuss.* 2015, 183 (0), 83-95. Il candidato risulta essere primo autore nelle suddette pubblicazioni perché ha condotto personalmente gli esperimenti di sintesi dei complessi del Ferro, le prove catalitiche e ha partecipato alla stesura dei manoscritti.
- Dal 2013** Il dott. Antonio Buonerba a partire dal 2013 è stato coinvolto in un'attività di collaborazione dal Prof. **Leone Oliva** del Dipartimento di Chimica e Biologia dell'Università degli Studi di Salerno al fine di sviluppare nuovi materiali polimerici nanostrutturati. Questa collaborazione è testimoniata dalle seguenti pubblicazioni: 1) Galdi, N.; Buonerba,\* A.; Oliva, P.; Oliva, L., Nanostructured ethylene-styrene copolymers. *Polym. Chem.* 2014, 5 (8), 3045-3052. 2) Galdi, N.; Buonerba, A.; Oliva, L., Olefin-Styrene Copolymers. *Polymers* 2016, 8 (11), 405. Il candidato ha partecipato al processo di caratterizzazione dei suddetti materiali poliolefinici e alla stesura dei manoscritti.
- Dal 2011** Il dott. Antonio Buonerba a partire dal 2011 ha intrapreso un'attività di collaborazione con la Prof.ssa **Patrizia Canton** del Dipartimento di Scienze Molecolari e Nanosistemi dell'Università Ca'Foscari Venezia, allo scopo di sviluppare e caratterizzare mediante tecniche di microscopia a trasmissione elettronica (TEM) materiali polimerici funzionali e sistemi catalitici eterogenei costituiti da nanoparticelle metalliche supportate da materiali polimerici nanoporosi. Questa collaborazione è testimoniata dalle seguenti pubblicazioni: 1) Buonerba, A.; Cuomo, C.; Ortega Sánchez, S.; Canton, P.; Grassi, A., Gold Nanoparticles Incarcerated in Nanoporous Syndiotactic Polystyrene Matrices as New and Efficient Catalysts for Alcohol Oxidations. *Chem. Eur. J.* 2012, 18 (2), 709-715. 2) Buonerba, A.; Speranza, V.; Canton, P.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A., Novel nanostructured semicrystalline ionomers by chemoselective sulfonation of multiblock copolymers of syndiotactic polystyrene with polybutadiene. *RSC Adv.* 2014, 4 (104), 60158-60167. 3) Noschese, A.; Buonerba,\* A.; Canton, P.; Milione, S.; Capacchione, C.; Grassi, A., Highly efficient and selective reduction of nitroarenes into anilines catalyzed by gold nanoparticles incarcerated in a nanoporous polymer matrix: Role of the polymeric support and insight into the reaction mechanism. *J. Catal.* 2016, 340, 30-40. Il candidato risulta essere primo autore, come pure autore corrispondente, tra le suddette pubblicazioni, perché ha condotto personalmente gli esperimenti di sintesi e sviluppo dei materiali polimerici e dei catalizzatori e ha partecipato alla stesura dei manoscritti.

- Dal 2011** Il dott. Antonio Buonerba a partire dal 2011 ha intrapreso un'attività di collaborazione con il Prof. **Martino di Serio** del Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università degli Studi di Napoli Federico II, allo scopo di sviluppare nuovi sistemi catalitici basati su materiali polimerici funzionalizzati per la produzione di biodiesel e biolubrificanti. Questa collaborazione è testimoniata dalle seguenti pubblicazioni: Vitiello, R.; Buonerba, A.; Tesser, R.; Di Serio, M.; Grassi, A.; Santacesaria, E. In Use of waste materials for biodiesel production, DGMK Tagungsbericht, 2012; pp 49-54. Il candidato ha sintetizzato, sviluppato e caratterizzato i sistemi catalitici che sono stati quindi testati in processi di rilevanza industriale dal gruppo di ricerca del Prof. Di Serio.
- Dal 2010** Il dott. Antonio Buonerba a partire dal 2010 ha intrapreso un'attività di collaborazione con il dott. **Vito Speranza** del Dipartimento di Ingegneria Industriale dell'Università degli Studi di Salerno, volta allo sviluppo e la caratterizzazione di film sottili di materiali polimerici mediante tecniche di microscopia a forza atomica (AFM). Questa collaborazione è testimoniata dalle seguenti pubblicazioni: 1) Buonerba, A.; Cuomo, C.; Speranza, V.; Grassi, A., Crystalline Syndiotactic Polystyrene as Reinforcing Agent of cis-1,4-Polybutadiene Rubber. *Macromolecules* 2010, 43 (1), 367-374. 2) Buonerba, A.; Speranza, V.; Grassi, A., Novel Synthetic Strategy for the Sulfonation of Polybutadiene and Styrene-Butadiene Copolymers. *Macromolecules* 2013, 46 (3), 778-784. 3) Capacchione, C.; De Roma, A.; Buonerba, A.; Speranza, V.; Milione, S.; Grassi, A., Syndiotactic Polystyrene-block-Poly(methyl methacrylate) Copolymer via Click Chemistry. *Macromol. Chem. Phys.* 2013, 214 (17), 1990-1997. 4) Buonerba, A.; Speranza, V.; Canton, P.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A., Novel nanostructured semicrystalline ionomers by chemoselective sulfonation of multiblock copolymers of syndiotactic polystyrene with polybutadiene. *RSC Adv.* 2014, 4 (104), 60158-60167. 5) Buonerba, A.; Speranza, V.; Capacchione, C.; Milione, S.; Grassi, A., Improvement of tensile properties, self-healing and recycle of thermoset styrene/2-vinylfuran copolymers via thermal triggered rearrangement of covalent crosslink. *Eur. Polym. J.* 2018, 99, 368-377. Il candidato risulta essere primo autore, come pure autore corrispondente, tra le suddette pubblicazioni, perché ha condotto personalmente gli esperimenti di sintesi e sviluppo dei materiali polimerici, ha partecipato alla fase di caratterizzazione mediante AFM e ha partecipato alla stesura dei manoscritti.

### **3.11. AFFILIAZIONE A SOCIETÀ SCIENTIFICHE**

---

Il Dr. Antonio Buonerba è attualmente affiliato alla *Società Chimica Italiana* nella divisione di Chimica Inorganica (SCI; <https://www.soc.chim.it/>), alla Society of Chemical Industry SCI; <https://www.soci.org/>) ed è stato affiliato alla *American Chemical Society* (ACS; <https://www.acs.org/>).

### **3.13. ATTIVITÀ DI REVISORE DI ARTICOLI SCIENTIFICI (PEER-REVIEWER)**

---

Dr. Antonio Buonerba è attivo come revisore anonimo di articoli scientifici nei processi di revisione (peer-review) per diverse riviste scientifiche di rilevanza internazionale, tra le quali: *ACS Applied Materials & Interface*, *Applied Catalysis A: General*, *ChemCatChem*, *Catalysis Communications*, *ChemistryOpen*, *ChemistrySelect*, *European Journal of Inorganic Chemistry*, *Fuel Processing Technology*, *Inorganica Chimica Acta*, *Macromolecules*, *New Journal of Chemistry*, *Polymer*, *Polymers*, *Reactive & Functional Polymers*, *RSC Advances*, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*.

## **4. ATTIVITÀ DIDATTICA**

---

### **4.1. INCARICHI DI DIDATTICA CONFERITI DA ISTITUZIONI UNIVERSITARIE**

**A.A. 2019–2020.** Il candidato è attualmente titolare di un incarico di docenza per l'insegnamento di Chimica (SSD: CHIM-03; numero di ore complessivo: 50) presso il Corso di Laurea in Scienze Biologiche del Dipartimento di Scienze e Tecnologie dell'Università degli Studi del Sannio, Benevento.

Insegnamento associato al corso di Chimica Generale ed Inorganica con docente Prof.ssa Daniela Pappalardo (pappal@unisannio.it).

Bando di selezione pubblica: Decreto N. 83/2019; Prot. n. 0000963 del 7/8/2019 - UOR: SI000015 emanato dall'Università degli Studi del Sannio, Benevento.

**A.A. 2018–2019.** Il candidato è stato titolare di un incarico di docenza per l'insegnamento di Chimica (SSD: CHIM-03; numero di ore complessivo: 50) presso il Corso di Laurea in Scienze Biologiche del Dipartimento di Scienze e Tecnologie dell'Università degli Studi del Sannio, Benevento.

Insegnamento associato al corso di Chimica Generale ed Inorganica con docente Prof.ssa Daniela Pappalardo (pappal@unisannio.it).

Bando di selezione pubblica: Decreto N. 70/2018; Prot. n. 0000720 - 30/07/2018 - UOR: SI000015 emanato dall'Università degli Studi del Sannio, Benevento.

**A.A. 2018–2019.** Il candidato è stato titolare di un incarico di docenza per l'insegnamento di Esercitazioni di Chimica Generale nell'ambito delle attività "Help Teaching" (SSD: CHIM-03; numero di ore complessivo: 20) presso il Corso di Laurea in Scienze Biologiche del Dipartimento di Chimica e Biologia dell'Università degli Studi di Salerno.

Insegnamento associato al corso di Chimica Generale ed Inorganica con docente Prof. Alfonso Grassi (agrassi@unisa.it).

Bando di selezione pubblica: Prot. N. 211361 del 12/10/2018, Rep.8221/2018 emanato dall'Università degli Studi di Salerno.

**A.A. 2017–2018.** Il candidato è stato titolare di un incarico di docenza per l'insegnamento di Chimica (SSD: CHIM-03; numero di ore complessivo: 50) presso il Corso di Laurea in Scienze Biologiche del Dipartimento di Scienze e Tecnologie dell'Università degli Studi del Sannio, Benevento.

Insegnamento associato al corso di Chimica Generale ed Inorganica con docente Prof.ssa Daniela Pappalardo (pappal@unisannio.it).

Bando di selezione pubblica: N. 38/2017, Prot. n. 718 del 16/06/2017 emanato dall'Università degli Studi del Sannio, Benevento.

**A.A. 2016–2017.** Incarico di docenza per l'insegnamento di Chimica Generale e Inorganica nell'ambito delle attività "Help Teaching" (numero di ore complessivo: 32) presso Corso di Laurea in Valutazione e Controllo Ambientale dell'Università degli Studi di Salerno.

Insegnamento associato al corso di Chimica Generale ed Inorganica con docente Prof. Carmine Capacchione (ccapacchione@unisa.it).

Bando di selezione pubblica: Rep. 3881/2016; Prot.44018 del 03/08/2016, codice concorso 08/13, emanato dall'Università degli Studi di Salerno.

**A.A. 2011–2012.** Incarico di docenza per l'insegnamento di Chimica Generale e Inorganica nell'ambito delle attività di supporto a esercitazioni in aula o in laboratorio (numero di ore complessivo: 24) presso il corso di Laurea in Scienze Biologiche della Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università degli Studi di Salerno.

Insegnamento associato al corso di Chimica Generale ed Inorganica con docente Prof. Alfonso Grassi ([agrassi@unisa.it](mailto:agrassi@unisa.it)).

Bando di selezione pubblica: Prot. N. 780 del 20/06/2011, codice concorso 10/46, emanato dall'Università degli Studi di Salerno.

**A.A. 2009–2010.** Incarico di docenza per l'insegnamento di Chimica Organica nell'ambito delle attività di tutorato didattico-integrative (numero di ore complessivo: 24) presso il corso di Laurea in Valutazione e Controllo Ambientale della Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università degli Studi di Salerno.

Insegnamento associato al corso di Chimica Organica con docente Prof. Carmine Gaeta ([cgaeta@unisa.it](mailto:cgaeta@unisa.it)).

Bando di selezione pubblica con codice concorso 16/29, emanato dall'Università degli Studi di Salerno.

**A.A. 2009–2010.** Incarico di docenza per l'insegnamento di Citologia e Istologia nell'ambito delle attività di tutorato didattico-integrative (numero di ore complessivo: 24) presso il corso di Laurea in Scienze Biologiche della Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università degli Studi di Salerno.

Insegnamento associato al corso di Citologia e Istologia con docente Prof.ssa Flaminia Gay ([fgay@unisa.it](mailto:fgay@unisa.it)).

Bando di selezione pubblica con codice concorso 16/46, emanato dall'Università degli Studi di Salerno.

**A.A. 2009–2010.** Incarico di docenza per l'insegnamento di Chimica Generale e Inorganica nell'ambito delle attività di tutorato didattico-integrative (numero di ore complessivo: 24) presso il corso di Laurea in Scienze Biologiche della Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università degli Studi di Salerno.

Insegnamento associato al corso di Chimica Generale e Inorganica con docente Prof. Alfonso Grassi ([agrassi@unisa.it](mailto:agrassi@unisa.it)).

Bando di selezione pubblica con codice concorso 14/46, emanato dall'Università degli Studi di Salerno.

**A.A. 2009–2010.** Incarico di docenza per l'insegnamento di Chimica Generale e Inorganica nell'ambito delle attività di tutorato didattico-integrative (numero di ore complessivo: 20) presso il corso di Laurea in Chimica della Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università degli Studi di Salerno.

Insegnamento associato al corso di Chimica Generale e Inorganica con docente Prof. Pasquale Longo ([plongo@unisa.it](mailto:plongo@unisa.it)).

Bando di selezione pubblica con codice concorso 32/46, emanato dall'Università degli Studi di Salerno.

## **4.2. NOMINE DI CULTORE DELLA MATERIA CONFERITE DA UNIVERSITÀ**

**A.A. 2019–2020.** Il candidato è stato nominato Cultore della Materia per tutte le attività di supporto agli insegnamenti afferenti al settore scientifico disciplinare SSD: CHIM/03 – Chimica Generale e Inorganica, dall’Università degli Studi del Sannio di Benevento per l’annualità accademica 2019-2020, con Decreto N. 27/2020, Prot. n. 0000279 del 19/02/2020 - [UOR: SI000015].

**A.A. 2018–2019.** Il candidato è stato nominato Cultore della Materia per tutte le attività di supporto agli insegnamenti afferenti al settore scientifico disciplinare SSD: CHIM/03 – Chimica Generale e Inorganica, dall’Università degli Studi del Sannio di Benevento per l’annualità accademica 2017-2018, con Decreto N. 10/2018, Prot. n. 0000198 del 15/02/2018 - [UOR: SI000015].

**A.A. 2017–2018.** Il candidato è stato nominato Cultore della Materia per tutte le attività di supporto agli insegnamenti afferenti al settore scientifico disciplinare SSD: CHIM/03 – Chimica Generale e Inorganica, dall’Università degli Studi del Sannio di Benevento per l’annualità accademica 2017-2018, con Decreto N. 10/2018, Prot. n. 0000198 del 15/02/2018 - [UOR: SI000015].

## **4.3. PARTECIPAZIONE IN QUALITÀ DI DOCENTE A CONTRATTO A SEDUTE DI ESAMI UNIVERSITARI**

**2017–2020.** IL candidato, in qualità di docente a contratto di Chimica e di Cultore della Materia in Chimica Generale ed Inorganica presso l’Università degli Studi del Sannio Benevento, ha presieduto alle sedute di esame di Chimica Generale e Inorganica degli anni accademici 2017-2018, 2018-2019 e 2019-2020 assieme alla Prof.ssa Daniela Pappalardo (pappal@unisannio.it), afferente alla medesima Istituzione.

## **4.4. INCARICHI DA PARTE DI UNIVERSITÀ DI PROGETTI “ALTERNANZA SCUOLA-LAVORO”**

**2017–2019.** Il candidato, nel triennio 2017-2019, è stato incaricato dal Dip. di Chimica e Biologia dell’Università degli Studi di Salerno, in convenzione con l’Istituto Superiore “*Publio Virgilio Marone*” di Mercato San Severino, di svolgere l’attività di Tutor nei percorsi di formazione “*Alternanza Scuola-Lavoro*” per le classi 3<sup>a</sup>, 4<sup>a</sup> e 5<sup>a</sup> del suddetto Istituto.  
URL: <https://www.dcb.unisa.it/didattica/alternanza-scuola-lavoro/progetti?dettaglio=60>

## **5. AUTORIZZAZIONE AL TRATTAMENTO DEI DATI**

---

Il sottoscritto autorizza al trattamento dei dati personali contenuti in questo documento in ottemperanza all'articolo 13 del General Data Protection Regulation 679/16 e all'articolo 13 del Decreto Legislativo Italiano n.196 datato 30 giugno 2003.

[I hereby authorize to use and process the personal details contained in this document in compliance with the General Data Protection Regulation 679/2016 and the article n.13 of the Italian Legislative Decree n. 196 dated June 30<sup>th</sup>, 2003.]

*10 agosto 2020, Fisciano (SA), Italia*

*Antonio Buonerba*

A handwritten signature in black ink, appearing to read "Buonerba".