

# CURRICULUM VITAE di:

Nominativo	Simonetta Fornarini
------------	---------------------

## Posizione accademica

Macrosettore:	03 Scienze chimiche
Settore Concorsuale:	03/B1 - FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI
Settore Scientifico Disciplinare:	CHIM/03
Qualifica:	Professore di prima fascia
Anzianità nel ruolo:	17 a
Sede Universitaria:	Università degli Studi di Roma "La Sapienza"
Struttura di afferenza (dipartimento o altro)	Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco

Posizioni ricoperte precedentemente nel medesimo ateneo o in altri

Periodo	Fascia	Ateneo
1992-2000	Professore seconda fascia	Università degli Studi di Roma "La Sapienza"
1983-1992	Ricercatore universitario	Università degli Studi di Roma "La Sapienza"

## Publicazioni Scientifiche

n. progr.	anno	Descrizione pubblicazione
1	2017	<b>Cisplatin and transplatin interaction with methionine: bonding motifs assayed by vibrational spectroscopy in the isolated ionic complexes</b> Roberto Paciotti, Davide Corinti, Alberto De Petris, Alessandra Ciavardini, Susanna Piccirillo, Cecilia Coletti, Nazzareno Re, Philippe Maitre, Bruno Bellina, Perdita Barran, Barbara Chiavarino, Maria Elisa Crestoni and Simonetta Fornarini <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> , <b>2017</b> , <i>19</i> , 26697-26707
2	2017	<b>Experimental and Computational investigation of Salophen-Zn Gas Phase Complexes with Cations: Possible Cationic Interference in Anionic Recognition</b> Ciavardini, Alessandra; Fornarini, Simonetta; Dalla Cort, Antonella; Piccirillo, Susanna; Scuderi, Debora; Bodo, Enrico <i>J. Phys. Chem. A</i> , <b>2017</b> , <i>121</i> , 7042-7050.

3	2017	<p><b>Undervalued N3-Coordination Revealed in the Cisplatin Complex with 2'-Deoxyadenosine-5'-Monophosphate by a Combined IRMPD and Theoretical Study</b>  Barbara Chiavarino, Maria Elisa Crestoni, Simonetta Fornarini, Debora Scuderi and Jean-Yves Salpin <i>Inorg. Chem.</i>, 2017, 56, 8793–8801</p>
4	2017	<p><b>Vibrational signatures of gaseous Meisenheimer complexes bonded at carbon and nitrogen</b>  Barbara Chiavarino, Maria Elisa Crestoni, Simonetta Fornarini <i>Int. J. Mass Spectrom.</i> 2017, 418, 173-179.</p>
5	2017	<p><b>Adenosine monophosphate recognition by zinc–salophen complexes: IRMPD spectroscopy and quantum modeling study</b>  Alessandra Ciavardini, Antonella Dalla Cort, Simonetta Fornarini, Debora Scuderi, Anna Giardini, Gianpiero Forte, Enrico Bodo, Susanna Piccirillo <i>J. Molecular Spectroscopy</i> 201, 335,108–116.</p>
6	2017	<p><b>Hydrolysis of cis- and transplatin: structure and reactivity of the aqua complexes in a solvent free environment</b>  Davide Corinti, Cecilia Coletti, Nazzareno Re, Susanna Piccirillo, Marco Giampà, M. Elisa Crestoni, S. Fornarini <i>RSC Adv.</i> 2017, 7, 15877-15884.</p>
7	2017	<p><b>Cisplatin Primary Complex with L-Histidine Target Revealed by IRMPD Spectroscopy</b>  Davide Corinti, Alberto De Petris, Cecilia Coletti, Nazzareno Re, Barbara Chiavarino, Maria Elisa Crestoni, Simonetta Fornarini <i>ChemPhysChem</i> 2017, 18, 318-325.</p>
8	2016	<p><b>A systematic account on aromatic hydroxylation by a cytochrome P450 model Compound I: A low-pressure mass spectrometry and computational study</b>  Fabián G. Cantú Reinhard, Mala A. Sainna, Pranav Upadhayay, G. Alex Balan, Devesh Kumar, Simonetta Fornarini, Maria Elisa Crestoni, Sam P. de Visser <i>Chem. Eur. J.</i> 2016, 22, 18608-18619.</p>
9	2016	<p><b>Amino-acids oxidation: a combined study of cysteine oxo-forms by IRMPD spectroscopy and simulations</b>  Debora Scuderi, Enrico Bodo, Barbara Chiavarino, Simonetta Fornarini, Maria Elisa Crestoni  <i>Chem. Eur. J.</i> 2016, 22, 17239-17250</p>
10	2016	<p><b>Effects of Aromatic Fluorine Substitution on Protonated Neurotransmitters: The Case of 2-Phenylethylamine</b>  Markus Schütz, Aude Bouchet, Barbara Chiavarino, Maria Elisa Crestoni, Simonetta Fornarini, Otto Dopfer <i>Chem. Eur. J.</i> 2016, 22, 8124-8136.</p>
11	2016	<p><b>IRMPD signature of protonated pantothenic acid, a ubiquitous nutrient</b>  Simonetta Fornarini, Barbara Chiavarino, Davide Corinti, Luisa Mannina, Vincent Steinmetz, M. Elisa Crestoni <i>Chem. Phys. Lett.</i> 2016, 646, 162-167.</p>
12	2016	<p><b>Cisplatin Binding to Biological Ligands Revealed at the Encounter Complex Level by IR Action Spectroscopy</b>  Davide Corinti, Cecilia Coletti, Nazzareno Re, Barbara Chiavarino, Maria Elisa Crestoni, Simonetta Fornarini <i>Chem. Eur. J.</i> 2016, 22, 3794-3803.</p>
13	2015	<p><b>IR spectrum of the protonated neurotransmitter 2-phenylethylamine: dispersion and anharmonicity of the NH<sub>3</sub><sup>+</sup>-π interaction</b>  Aude Bouchet, Markus Schütz, Barbara Chiavarino, Maria Elisa Crestoni, Simonetta Fornarini, Otto Dopfer  <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i>, 2015, 17, 25742-25754.</p>
14	2015	<p><b>Serine O-sulfation probed by IRMPD spectroscopy</b>  Roberto Paciotti, Cecilia Coletti, Nazzareno Re, Debora Scuderi, Barbara Chiavarino, Simonetta Fornarini, Maria Elisa Crestoni <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i>, 2015, 17, 25891-25904.</p>
15	2015	<p><b>Elusive Sulfurous Acid: Gas Phase Basicity and IR Signature of the Protonated Species</b>  Rajeev K. Sinha, Debora Scuderi, Philippe Maitre, Barbara Chiavarino, Maria Elisa Crestoni, Simonetta Fornarini <i>J. Phys. Chem. Lett.</i>, 2015, 6, 1605–1610</p>

16	2015	<b>Nitrosyl-Heme and Anion-Arene Complexes: Structure, Reactivity and Spectroscopy</b> Maria Elisa Crestoni, Barbara Chiavarino, Simonetta Fornarini <i>Pure Appl. Chem.</i> <b>2015</b> , <i>87</i> , 379-390.
17	2015	<b>Interaction of cisplatin with dGMP : a combined IRMPD and theoretical study</b> Chiavarino, Barbara; Crestoni, Maria Elisa; Fornarini, Simonetta; Scuderi, Debora; Salpin, Jean-Yves <i>Inorg. Chem.</i> <b>2015</b> , <i>54</i> , 3513-3522.
18	2015	<b>Binding of Azole Drugs to Heme. QSAR, Molecular Docking, Energy-Resolved Collision-Induced Dissociation and Car-Parrinello Molecular Dynamics Calculations</b> Alberto De Petris, Maria Elisa Crestoni, Adele Pirolli, Carme Rovira, Javier Iglesias-Fernández, Barbara Chiavarino, Rino Ragno, Simonetta Fornarini <i>Polyhedron</i> <b>2015</b> , <i>90</i> , 245-251.
19	2015	<b>Exploring the Conformational Variability in the Heme b Propionic Acid Side Chains through the Effect of a Biological Probe: A Study on the Isolated Ions</b> Alberto De Petris, Barbara Chiavarino, Maria Elisa Crestoni, Cecilia Coletti, Nazzareno Re, Simonetta Fornarini <i>J. Phys. Chem. B</i> <b>2015</b> , <i>119</i> , 1919-1929.
20	2015	<b>A comprehensive test set of epoxidation rate constants by iron(IV)-oxo porphyrin cation radical complexes</b> Mala A Sainna, Suresh Kumar, Devesh Kumar, Simonetta Fornarini, Maria Elisa Crestoni, Samuel de Visser <i>Chemical Science (Chem. Sci.)</i> , <b>2015</b> , <i>6</i> , 1516 – 1529.

## Titoli

- Responsabilità scientifica generale o di unità (work package, unità nazionale nei progetti europei o locale in quelli nazionali ecc.) per progetti di ricerca internazionali e nazionali ammessi al finanziamento sulla base di bandi competitivi che prevedano la revisione tra pari:
  - PRIN 1997-2003-2006-2009
  - Progetti EU presso il centro CLIO: IC005-04, IC002-05, IC019-07, IC014-13, IC 15-007, IC 16-007
- Direzione o partecipazione a comitati di direzione di riviste Scopus/WOS o classificate da ANVUR, nonché di collane editoriali, enciclopedie e trattati di riconosciuto prestigio nel settore:
  - Membro del comitato editoriale di *International Journal of Mass Spectrometry*
- Partecipazione al collegio dei docenti nell'ambito di dottorati di ricerca accreditati dal Ministero:
  - Membro del collegio dei docenti del dottorato in Scienze Farmaceutiche presso l'università degli studi di Roma La Sapienza
- significativi riconoscimenti per l'attività scientifica, incluse l'affiliazione ad accademie di riconosciuto prestigio nel settore e la presidenza di società scientifiche di riconosciuto prestigio:
  - membro della Società Chimica Italiana e della American Chemical Society
- partecipazione come relatore a convegni di carattere scientifico nazionali o internazionali:
  - numerose relazioni su invito in conferenze internazionali (e. g. ESOR, ESOC, KISPOC, IMSC) e presso università italiane e straniere (in USA, Canada, Europa).

data  
13 dicembre 2017

firma

