

Curriculum Vitae

INFORMAZIONI PERSONALI

Dr. Simone d'Agostino, PhD



Nato il 26/ 10/ 1981

CF DGSSMN81R26G482R

+393288524998

simone.dagostino2@unibo.it

orcid 0000-0003-3065-5860



ATTIVITÀ DI RICERCA

La mia attività di ricerca parte nel 2009, anno in cui ho iniziato il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche (ciclo XXIV), avvicinandomi chimica dello stato solido e quindi alla cristallografia. Dapprima mi sono occupato di (i) sintesi meccanochimica di complessi di ioni di metalli alcalini con eteri corona e (ii) network ibridi organico-organometallici basati su legami a idrogeno, (iii) sintesi e caratterizzazione di gel supramolecolari e studi sul polimorfismo di complessi d'argento da usare come gelatori. Durante gli anni di studi Post-Dottorati (dal 2012 ad oggi) ho condotto prevalentemente ricerche sull'interazione "luce-materia" focalizzandomi sui seguenti temi: (iv) sviluppo di materiali foto- e termo-cromici, (v) fluorescenti e fosforescenti, (vi) studio di fotoreazioni di tipo $[2n+2n]$ in materiali cristallini molecolari e complessi metallici di argento. Ultimamente sullo (vii) studio di sistemi dinamici allo stato solido, di (viii) soluzioni solide (leghe molecolari) e (ix) materiali 2D esfoliabili. Ogni ricerca condotta è stata portata a termine con successo facendo uso di una combinazione di tecniche VT-XRD (cristallo singolo e polveri), termiche (TGA/DSC), spettroscopiche (UV-Vis, fluo-fosforimetriche, FTIR e RAMAN) e microscopiche (CP-HSM e SEM).

CONTRIBUTI ATTIVITÀ SCIENTIFICHE E DIDATTICHE

In occasione dell'anno internazionale della cristallografia YUCR2014 ho contribuito assieme ad altri giovani ricercatori e sotto la direzione della Prof.ssa L. Maini alla realizzazione di laboratori didattici per bambini, presso START-Laboratorio di Culture Creative, che avevano come argomento i cristalli e la cristallografia.

ESPERIENZA PROFESSIONALE

02/05/2018 - in corso

Ricercatore a Tempo Determinato tipo a (junior)

Dipartimento di Chimica "G. Ciamician" (Unibo), Via F. Selmi 2, 40126, Bologna (BO), Italia.

Ssd Chim/03 Chimica Generale E Inorganica

10/01/2018 – 06/02/2018

Prestazione Lavoro Autonomo Occasionale

Dipartimento di Chimica "G. Ciamician" (Unibo), Via F. Selmi 2, 40126, Bologna (BO), Italia.

Studio di fotoreattività $[2+2]$ di sali molecolari dell'acido 4amminocinnammico in stato solido, completamento e sottomissione di relativo articolo a rivista scientifica internazionale.

Assegnista di ricerca

Dipartimento di Chimica "G. Ciamician" (Unibo), Via F. Selmi 2, 40126, Bologna (BO), Italia.

Tutor Prof. Dario Braga

Settore scientifico-disciplinare CHIM/03

02/ 01/ 2012 – 01/01/2018

Ricerca di Base in Ambito dell'Ingegneria Cristallina Molecolare, della Chimica dello Stato Solido e Cristallografico. Attività di Correlatore in Tesi di Laurea Magistrali e Triennali. Gestione e manutenzione ordinaria del laboratorio RX.

02/01/2017 - 01/01/2018

Rinnovo: "Design and synthesis of luminescent and semiconducting crystalline materials"

02/01/2016 - 01/01/2017

Rinnovo: "Design and synthesis of luminescent and semiconducting crystalline materials"

- 02/01/2015 - 01/01/2016 "Design and synthesis of luminescent and semiconducting crystalline materials"
- 02/01/2014 - 01/01/2015 Rinnovo "Synthesis, characterization and applications of supramolecular gels"
- 02/01/2012 - 01/01/2014 "Synthesis, characterization and applications of supramolecular gels"
- Tutor Didattico**
Assistenza per Attività Didattica di Laboratorio
Presidenza della Scuola di Scienze (UniBo) Via F. Selmi 2, 40126, Bologna (BO), Italia.
<https://www.unibo.it/sitoweb/simone.dagostino2/didattica>
- AA 2017-2018 Chimica di Coordinazione con Laboratorio (66922) del cds in Chimica e Chimica dei Materiali
Materia: Chimica (00088) del cds in Astronomia
Chimica dei Materiali con Laboratorio (66935) del cds in Chimica e Chimica dei Materiali
- AA 2016-2017 Chimica di Coordinazione con Laboratorio (66922) del cds in Chimica e Chimica dei Materiali
Materia: Chimica (00088) del cds in Astronomia
Chimica dei Materiali con Laboratorio (66935) del cds in Chimica e Chimica dei Materiali
- AA 2015 - 2016 Chimica di Coordinazione con Laboratorio (66922) del cds in Chimica e Chimica dei Materiali
Chimica dei Materiali con Laboratorio (66935) del cds in Chimica e Chimica dei Materiali
- 2015 **Revisione di Libri Scientifici per Studenti delle Scuole Medie e Superiori**
"Scienze naturali, volumi 3 e 4, di M. Crippa, M. Rusconi, A. Mondadori scuola 2015"
- 2009-2015 **Controllo Polimorfismo su lotti di produzione dell'antibiotico Normix (Rifaximina)**
Collaborazione tra Gruppo di ricerca *Molecular Crystal Engineering* ed AlfaWasserman SPA.

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

- Il semestre AA 2013 - 2014 **Corso di Lingua Inglese – Fast Track (B2)** Livello B2
Centro Linguistico d'Ateneo (CLA), Unibo, Bologna (Bo), Italia.
- 14/ 04/ 2012 **Dottorato di Ricerca (PhD) in Scienze Chimiche** Livello 8 QEQ
Scuola di Dottorato in Scienze Chimiche, Bologna (Bo), Italia.
- 15/ 09/ 2008 **Esame di Stato per iscrizione all'Albo Professionale dei Chimici**
- 19/ 03/ 2008 **Laurea in Chimica (VO) - 110/110** Livello 7 QEQ
Università degli Studi di Bologna, Facoltà di Scienze NN, FF, MM, Bologna, Italia.
- 14/7/2000 **Maturità Tecnica Industriale (Perito) - Indirizzo Chimico - 95/100** Livello 5 QEQ
I.T.I.S. "A. Volta", Pescara (Pe), Italia.

ESPERIENZE ALL'ESTERO

- 01 / 03/ 2011 – 14 / 07/ 2011 **Monash University, Melbourne, Australia**
Vincitore di una borsa di studio Marco Polo, referente Prof. Stuart R. Batten.
- 10 / 01 / 2005 – 20 / 07 / 2005 **Universitat de Barcelona, Barcellona, Spagna**
Vincitore di una borsa di studio *Erasmus*, referente Prof. Juan Novoa.

Curriculum Vitae

COMPETENZE

Tecniche Chimiche ed Analitico Strumentali

- 1) Sintesi organica (leganti) ed inorganica (complessi metallici e polimeri di coordinazione).
- 2) Sintesi meccanochimiche di co-cristalli,
- 3) Diffrazione da raggi X su cristallo singolo (SCXRD) e polveri (PXR) a temperatura variabile. Risoluzione strutturale, identificazione di fasi cristalline ed analisi quantitativa di miscele policristalline.
- 4) Analisi Termiche: termogravimetria (TGA); calorimetria differenziale a scansione (DSC).
- 5) Microscopia a Piatto Riscaldante (HSM) ed in Luce Polarizzata (CPM)
- 6) Spettroscopiche: spettrofotometria UV-Vis e di fluorescenza/fosforescenza; spettroscopia infrarossa (FTIR).
- 7) Elettrochimiche: Voltammetria Ciclica (CV) e Voltammetria Differenziale Pulsata (DPV).

Tali competenze tecniche sono state acquisite durante la preparazione dell'esame di Laurea in Chimica (punti 1, 6 e 7), durante il corso di Dottorato in Scienze Chimiche (punti 1, 2, 3, 4, 5, 6) ed affinate durante lo svolgimento di studi Post-Dottorali (6 anni).

Altre capacità e competenze

Attività di *Reviewing* per pubblicazioni scientifiche su riviste internazionali:

- Royal Society of Chemistry (RSC): CrystEngComm, New Journal of Chemistry, Chemical Sciences.
- American Chemical Society (ACS): Crystal Growth & Design, Journal of Physical Chemistry C.
- Wiley-VCH: Chemistry Select, Acta Crystallographica B, Acta Crystallographica C.

Lingua madre

Italiano

Altre lingue

Inglese (B2, certificato CLA);
Spagnolo (Castigliano); Catalano.

Patente di guida

B, Automunito.

Affiliazioni ad Associazioni

- 1) Membro dell'Associazione Italiana di Cristallografia (AIC) dal 2010.
- 2) Membro della Società Chimica Italiana (SCI) divisione Chimica Inorganica dal 2015.
- 3) Esame di Stato per abilitazione Iscrizione all'Albo Professionale dei Chimici (2008)

PRODUZIONE SCIENTIFICA

Indicatori Bibliometrici (Fonte Web of Science al 16/05/2018)

Totale Pubblicazioni: 22 articoli + 1 contributo in volume.

Indice di Hirsch (H-index): 11.

Totale citazioni: 328 (296 senza autocitazioni)

Articoli in Rivista

[22] D. Braga, F. Grepioni, L. Maini, S. d'Agostino, **"From solid state structure and dynamics to crystal engineering"**, *Eur. J. In. Chem*, **2018**, DOI 10.1002/ejic.201800234

[21] F. Spinelli, **S. d' Agostino**, P. Taddei, C. D. Jones, J. W. Steed, F. Grepioni, **"Activating [4+4] photoreactivity in the solid-state via complexation: from 9-(methylaminomethyl)anthracene to its silver(I) complexes"**. *Dalton Trans.*, **2018**, 47, 5725–5733.

[20] **S. d'Agostino**, E. Boanini, D. Braga, F. Grepioni **"Size Matters: [2+2] Photoreactivity In Macro- and Micro-crystalline Salts of 4-Amino-Cinnamic Acid"**, *Cryst. Growth Des.*, **2018**, 18, 2510-2517.

[19] T. Rekiş, **S. d'Agostino**, D. Braga, F. Grepioni, **"Designing solid solutions of enantiomers: lack of enantioselectivity of chiral naphthalimide derivatives in the solid state"**, *Cryst. Growth Des.*, **2017**, 17, 6477–6485.

[18] **S. d'Agostino**, P. Taddei, E. Boanini, D. Braga, F. Grepioni, **"Photo- vs. mechano-induced polymorphism and single crystal to single crystal [2+2] photoreactivity in a bromide salt of 4-amino-cinnamic acid"**, *Cryst. Growth Des.*, **2017**, 17, 4491–4495.

- [17] D. Braga, F. Grepioni, L. Maini, S. d'Agostino, **"Making Crystals with a Purpose. A journey in crystal engineering"**, *IUCRJ*, **2017**, *4*, 369–379.
- [16] A. Carletta, F. Spinelli, **S. d'Agostino**, B. Ventura, M. R. Chierotti, R. Gobetto, J. Wouters, F. Grepioni, **"Halogen bond effects on the thermo- and photochromic behaviour of anil-based molecular co-crystals"** *Chem. Eu. J.*, **2017**, *23*, 5317 – 5329.
- [15] **S. d'Agostino**, F. Spinelli, E. Boanini, D. Braga and F. Grepioni, **"Single crystal to single crystal [2+2] photoreactions in chloride and sulphate salts of 4-amino-cinnamic acid via solid-solution formation: a structural and kinetic study"**, *ChemCommun.*, **2016**, *52*, 1899 - 1902.
- [14] F. Grepioni, **S. d'Agostino**, D. Braga, A. Bertocco, L. Catalano, B. Ventura. **"Fluorescent crystals and co-crystals of 1,8-naphthalimide derivatives: synthesis, structure determination and photophysical characterization"**, *J. Mater. Chem. C*, **2015**, *3*, 9425-9434.
- [13] M. Baroncini, **S. d'Agostino**, G. Bergamini, P. Ceroni, A. Comotti, P. Sozzani, I. Bassanetti, F. Grepioni, T. M. Hernandez, S. Silvi, M. Ventura and Alberto Credi. **"Photoinduced reversible phase change in porous molecular crystals based on star-shaped azobenzene tetramers"**, *Nature Chemistry*, **2015**, *7*, 634-640.
- [12] **S. d'Agostino**, F. Grepioni, D. Braga, and B. Ventura. **"Tipping the Balance with the Aid of Stoichiometry: room Temperature Phosphorescence versus Fluorescence in Organic Cocrystals"**, *Cryst. Growth Des.* **2015**, *15*, 2039–2045.
- [11] B. Ventura, A. Bertocco, D. Braga, L. Catalano, **S. d'Agostino**, F. Grepioni, and P. Taddei. **"Luminescence Properties of 1,8-Naphthalimide Derivatives in Solution, in Their Crystals, and in Co-crystals: Toward Room- Temperature Phosphorescence from Organic Materials"**, *J. Phys. Chem. C* **2014**, *118*, 18646–18658.
- [10] **S. d'Agostino**, D. Braga, F. Grepioni, P. Taddei. **"An Intriguing Case of Pseudo-Isomorphism between Chiral and Racemic Crystals of rac- and (S)/(R)2-(1,8-naphthalimido)-2-quinuclidin-3-yl, and Their Reactivity Toward I2 and IBr"**, *Cryst. Growth Des.* **2014**, *14*, 821–829.
- [9] **S. d'Agostino**, F. Grepioni, D. Braga, D. Moreschi, V. Fattori, S. Di Motta, F. Negri. **"Exciton coupling in molecular salts of 2-(1,8-naphthalimido)ethanoic acid and cyclic amines: modulation of the solid-state luminescence"**, *CrystEngComm*, **2013**, *15*, 10470–10480.
- [8] D. Braga, **S. d'Agostino**, E. D'Amen, F. Grepioni, D. Genovese, L. Prodi, M. Sgarzi. **"A quest for supramolecular gelators: silver(I) complexes with quinoline-urea derivatives"**, *Dalton Trans.*, **2013**, *42*, 16949–16960.
- [7] D. Braga, **S. d'Agostino**, F. Grepioni. **"Co-crystals and Salts obtained from dinitrogen bases and 1,2,3,4-cyclobutane tetracarboxylic acid, and the use of the latter as a template for solid-state photocyclization reactions"**, *Cryst. Growth and Des.*, **2012**, *12*, 4880–4889.
- [6] D. Braga, **S. d'Agostino**, F. Grepioni. **"Shape takes the lead: Templating Organic 3D-Frameworks around Organometallic Sandwich Compounds"**, *Organometallics*, **2012**, *31*, 1688–1695.
- [5] D. Braga, **S. d'Agostino**, E. Dichiarante, L. Maini, F. Grepioni. **"Dealing with Crystal Forms (The Kingdom of Serendip?)"**. *Chem. Asian J.*, **2011**, *6*, 2214-2223.
- [4] D. Braga, **S. d'Agostino**, M. Gandolfi, K. Rubini, F. Grepioni. **"Polymorphs from supramolecular gels: four crystal forms of the same silver(I) supergelator crystallized directly from its gels"**. *ChemCommun.*, **2011**, *47*, 5154-5156.
- [3] D. Braga, **S. d'Agostino**, M. Gandolfi, K. Rubini, F. Grepioni. **"Crystal to crystal transformations and polymorphism in anionic hydrogen bonding networks stabilized by crown ether metal complexes"**. *Dalton Trans.*, **2011**, *40*, 4765–4777.
- [2] D. Braga, **S. d'Agostino**, F. Grepioni. **"Surprising robustness of a unit cell: isomorphism in caesium 18-crown[6] complexes with aromatic polycarboxylate anions"**. *CrystEngComm*, **2011**, *13*, 1366-1372.
- [1] D. Braga, **S. d'Agostino**, M. Polito, K. Rubini, F. Grepioni. **"Caesium 18-crown[6] complexes with aromatic polycarboxylate anions: preparation, solid-state characterization and thermal behaviour"**. *CrystEngComm*, **2009**, *11*, 1994 – 2002.

Contributo in volume

- [1] D. Braga, E. Dichiarante, F. Grepioni, G. I. Lampronti, L. Maini, P. P. Mazzeo, **S. d'Agostino**. **"Mechanical Preparation of Crystalline Materials. An Oxymoron?"**, *Supramolecular Chemistry: From Molecules to Nanomaterials*, **2012**, *6*, 2993-3007, in **"Supramolecular Chemistry: From Molecules to Nanomaterials"**. Edited by P. A. Gale and J. W. Steed, Chichester: John Wiley & Sons, Ltd., ISBN: 9780470746400.

Brevetti Depositati

- [1] Co-cristalli con elevata resa quantica di fluorescenza basati su derivati della 1,8-naftalimide e co-formeri alogenati. Domanda di brevetto italiano N.RM2014A000327, depositata il 20-06-2014.

Curriculum Vitae

Progetti Sottomessi / in Sottomissione

Come Coordinatore Scientifico: (1) "Bright and Efficient emitters MAterials Based on Wholly Organic Phosphorescent Co-Crystals" Per SAMSUNG GRO2018, in preparazione; (2) "Sviluppo di Nuovi Semiconduttori Indigoidi Bio-Compatibili e a Basso Impatto Ambientale per Applicazioni In Elettronica Organica (BioSemiCon)" per ALMAIDEA Linea d'intervento Junior.
Come Partecipante: (3) "Multifunctional Molecular Materials by Design (M3D)" per PRIN2015.

Congressi

"*Italian Crystal Growth 2017 - ICG17*", Milano (Italia) 20-21/11/2017.

POSTER: "**Fluorescent and Phosphorescent Co-Crystals Based on Halogen Bonds pt 2**".

"*Merk Young Chemist Symposium 2017 - MYCS17*", Milano Marittima (Italia) 13-15/11/2017.
COMUNICAZIONE ORALE FLASH E POSTER: "**[2+2] Photocycloaddition In Crystalline Molecular Salts Of 4-Amino-Cinnamic Acid, An XRD Study**".

"*International Simposyium on Halogen Bond 2 - ISXB2*", Goteborg (Svezia) dal 06/10-06/2016,
COMUNICAZIONE ORALE: "**Fluorescent and Phosphorescent Co-Crystals Based on Halogen Bonds**".

"*Meeting of the Italian and Spanish Crystallographic Associations 2016 - MISCA 2016*", Puerto de la Cruz (Spagna) 21-26/06/2016.

COMUNICAZIONE ORALE E POSTER: "**Crystal engineering of molecular salts for single-crystal to single-crystal [2+2] cycloaddition photoreactions**".

"*Crystals in Food & Pharma - CFP@BO*", Bologna (Italia) 14-16 / 06 / 2015. STAFF MEMBER

"from Molecule to Crystal to Funcional form" – Erice (Tp, Italia) 6-14 / 06 / 2015.

POSTER: "**Phosphorescence vs fluorescence in organic co-crystals: a matter of co-former choice and stoichiometry**".

"E-MRS Spring Meeting Symposium Q "Organic semiconducting single crystals: from fundamentals to advanced devices", Lilla (Francia) 11-15 / 05 / 2015.

COMUNICAZIONE ORALE: "**Phosphorescence vs fluorescence in organic co-crystals: a matter of co-former choice and stoichiometry**".

"*Gordon Research Seminars and Conference - Crystal Engineering*" Waterville Valley (NH, USA) 31/05/2014 - 06/ 06 / 2014.

COMUNICAZIONE ORALE e POSTER: "**Organic Semiconductors as Potential Sensors for X-rays. Crystal Engineering of 1,8-Naphthalimide Derivatives and Co-Crystals with Iodine**".

"*Meeting of the Italian, Spanish and Swiss Crystallographic Associations 2013- MISSCA2013*" . Como (Italia) 9-12 / 09 / 2013.

POSTER: "**Exciton coupling in molecular salts of 2-(1,8-naphthalimido)ethanoic acid and cyclic amines: modulation of the solid-state luminescence "**

"*Crystal forms @ Bologna*" Bologna (Italia) 9-11 / 06 / 2010. STAFF MEMBER

"SCI-Divisione di chimica inorganica: Scuola nazionale di chimica organometallica" 23-27 / 05 / 2010. Bertinoro (FC, Italia).

"AIC-IUCR School: Adsorption, absorption and crystal growth". Gargnano (Br, Italia) 18-23 / 04 / 2010.

"Crystals, co-crystals, salts, solvates and their polymorphs: use, improvement and innovation". Bologna (Italia) 04-06 / 06 / 2009. STAFF MEMBER

"IC-CNR Bari workshop: PHARE 2009 – A modular workshop on global PHase Retrieval". Martina Franca (Ta, Italia) 23-24 / 04 / 2009.

COLLABORAZIONI

- Prof. J. Wouters, Université de Namur (UNamur), Namur (B).
- Dr.ssa Barbara Ventura, Istituto per la Sintesi Organica e la Fotoreattività (ISOF), Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR) di Bologna (I).

- Dr. T. Salzillo, Institut de Ciència de Materials (CSIC), Barcellona (E).
- Prof.ssa Paola Taddei, Dipartimento di Scienze Biomediche e Neuromotorie - Università di Bologna (UniBo), Bologna (I).
- Prof. J. Steed, University of Durham, Durham (UK).
- Prof.ssa E. Venuti, Dipartimento di Chimica Industriale T. Montanari - Università degli Studi di Bologna, Bologna (I).
- Prof. R. Gobetto, Dipartimento di Chimica - Università di Torino (UniTo), Torino (I).