

# CURRICULUM SCIENTIFICO E DIDATTICO

## PROF. ROBERTO SIMONUTTI

### *Sommario*

*1991 Laurea in Chimica*

*1991-1993 Specializzazione in Scienza e Tecnologia dei Materiali*

*1994-1997 Dottorato in Chimica Industriale all'Università di Milano*

*1995 Attività di ricerca per un anno all' Università di Duisburg-Essen (Germania)*

*1997-1998 Borsa di studio INSTM*

*1998-1999 Borsa Post-doc al Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley.*

*1999 Ricercatore di Chimica Industriale (CHIM/04) all'Università di Milano Bicocca*

*2015 Professore associato di Chimica Industriale (CHIM/04) all'Università di Milano Bicocca*

*2017 Abilitazione a Professore di I fascia per il settore concorsuale 03/C2 (31/3/2017)*

*Numero di Pubblicazioni con referee: 85 (Scopus, 13/11/2019)*

*h-index: 28*

*Citazioni Totali:3203 (Scopus 13/11/2019)*

### **Attività Scientifica**

Roberto Simonutti professore associato di Chimica Industriale, dopo la laurea in Chimica presso l'Università di Milano nel gruppo del Prof. M. Farina con tesi sulla sintesi di copoliammidi, si è specializzato in Scienza e Tecnologia dei Materiali ed ha conseguito il dottorato di ricerca in Chimica Industriale. Dal 1998 al 1999 il Dott. Simonutti ha fruito di una borsa di studio Post-Dottorato del Lawrence Berkeley National Laboratory, (Dipartimento dell'Energia del Governo degli Stati Uniti) presso il Dipartimento di Chimica della University of California at Berkeley. Dal 1° luglio 1999 ha preso servizio come ricercatore presso il Dipartimento di Scienza dei Materiali dell'Università di Milano Bicocca.

Dall'anno accademico 2000-2001 Roberto Simonutti ha in affidamento il Laboratorio di Chimica dei Materiali per il Corso di Laurea in Scienza dei Materiali in seguito rinominato Laboratorio di Chimica Macromolecolare. Nell'anno accademico 2014-2015 è titolare dei seguenti insegnamenti: Chimica dei Materiali Polimerici (CHIM/04) 8 CFU (corso di laurea in Scienza dei Materiali); Chimica Analitica e Strumentale con Laboratorio (CHIM/01) 2 CFU (corso di laurea in Scienze e Tecnologie Chimiche). Dal 2003 fa parte del collegio dei docenti del Dottorato di Nanotecnologie è Nanostrutture dell'Università di Milano Bicocca, attualmente denominato Scienza e Nanotecnologia dei Materiali.

Negli anni 1999-2007 il Prof. Simonutti si è occupato principalmente dei seguenti argomenti: 1) studio della morfologia e polimorfismo nei polimeri e copolimeri a base olefinica, essenzialmente da catalisi Ziegler-Natta; 2) confinamento di polimeri in nanocanali autoassemblati per lo studio delle interazioni deboli che sostengono queste complesse architetture supramolecolari; 3) formazione e caratterizzazione di nanocompositi polimerici con proprietà strutturali; 4) Studio di sistemi micro e mesoporosi per applicazioni industriali quali "Hydrogen and Methane storage" mediante diffusione di molecole sonda. Un ruolo fondamentale in queste attività ha ricoperto la spettroscopia di risonanza magnetica nucleare. Infatti, lo sviluppo di metodologie dedicate allo

studio di sistemi polimerici e compositi (tecniche basate sulla spin-diffusion, spettroscopia bidimensionale NMR con rotazione ad altissima velocità, NMR del gas xeno-129) permette di ottenere informazioni uniche su questi sistemi. Una linea di ricerca infatti è stata completamente dedicata allo sviluppo di nuove tecniche e sequenze NMR, che in particolare ha portato alla costruzione del primo sistema in Italia per la produzione di gas xeno iperpolarizzato per lo studio dei polimeri

Dal 2008 ad oggi l'attività di ricerca si è spostata maggiormente verso la sintesi di polimeri (tipicamente copolimeri a blocchi) per applicazioni nell'ambito della nanomedicina, la preparazione di blend (tipicamente elastomeri termoplastici), la fabbricazione di nanocompositi polimerici con proprietà funzionali, lo sviluppo di nuove metodiche NMR nel dominio del tempo (TD-NMR), a questo fine ha fondato il Laboratorio POSYLIFE (Polymer Synthesis for Life Improving).

La tecnica RAFT ha permesso anche di sintetizzare dei copolimeri a blocchi polistirene-*b*-polietileneossido-*b*-polistirene; questi polimeri sono stati utilizzati come supporto solido in cui far diffondere gli elettroliti liquidi utilizzati nelle dye-sensitized solar cell (DSSC). In questo modo sono state ottenute delle celle, definite "quasi-solid-state," con ottime efficienze di conversione e stabilità nel tempo. Sempre mediante copolimerizzazione RAFT si è ottenuta una serie di copolimeri costituiti da un blocco idrofobo di polistirene (PS) e un blocco idrofilo di poli(N,N-dimetilacrilammide) (PDMA), con lunghezza totale della catena variabile come pure il rapporto fra le lunghezze dei due blocchi. Sfruttando la loro natura anfifilica si è potuto indurre il *self-assembly* in un solvente selettivo e ottenere una complessa libreria di nanoparticelle (NP) polimeriche. In particolare il copolimero PDMA<sub>817</sub>-*b*-PS<sub>105</sub>, che in acqua forma micelle sferiche, è stato studiato mediante un rotore molecolare fotoluminescente che ha permesso di monitorare la formazione della micella nonché la mobilità molecolare del core polistirenico. Mentre il sistema PDMA<sub>10</sub>-*b*-PS<sub>62</sub> forma strutture gerarchiche sferiche di dimensione variabile intorno ai 100-200 nanometri, costituite da micelle primarie di pochi nanometri. Micelle costituite da PDMA-*b*-PS sono state opportunamente decorate con peptidi per superare la barriera ematoencefalica, gli ottimi risultati ottenuti aprono la prospettiva di sviluppare drug-delivery systems capaci di trasportare molecole attive nel trattamento dei tumori cerebrali. Sono stati sintetizzati e caratterizzati copolimeri a base acido polilattico e poliossazolina. Nel caso di copolimeri PEO-PLA sono state ottenute complesse morfologie micellari in funzione del rapporto fra i due blocchi e del buon solvente da cui si parte per il processo di self-assembly.

Mediante tecniche "grafting-to" sono state decorate nano particelle di titania con catene di PEG a varia lunghezza. La conformazione delle catene determinata con tecniche sperimentali è stata confrontata con quella calcolata con metodi ab-initio.

Dal 2018 è responsabile del laboratorio di sintesi di polimeri per la nano medicina presso il Centro di Nanomedicina dell'Università di Milano-Bicocca.

Nell'ambito dello sviluppo di materiali innovativi per l'energia, l'attività si è rivolta allo sviluppo di nuovi materiali capaci di modulare la luce, ovvero trasformare la luce blu puntuale prodotta da sorgenti LED in luce bianca diffusa. Il nanocomposito deve perciò basarsi su un polimero estremamente trasparente (PMMA) e contenere nanoparticelle ad elevato indice di rifrazione (tipicamente titania) e cromofori capaci di assorbire nel blu ed emettere nel giallo-rosso. L'attività di ricerca è stata finanziata da due progetti (uno della Fondazione CARIPLO ed uno della regione Lombardia) e si è focalizzata sulle seguenti tematiche: 1) sintesi e modificazione superficiale di titania di dimensioni opportune; 2) ottenimento di dispersioni omogenee di titania in lastre di PMMA e in altri polimeri trasparenti, 3) sviluppo di cromofori inorganici a base InP/ZnS e CuInZnS, 3) preparazione di lastre di PMMA contenenti titania e cromofori organici capaci di trasformare luce blu in luce bianca calda. L'attività ha permesso di costruire, utilizzando come sorgente LED blu, delle lampade (30 cm x 30 cm) capaci di produrre luce di ottima qualità (CRI >90 e CCT di circa 4000 K

Quantum dots CdSe/CdS (QD) con significativi “Stokes-shifts” e shell giganti sono attraenti per l'impiego in concentratori solari luminescenti. I concentratori solari luminescenti sono dispositivi che possono aumentare la produzione di celle solari e consentire la costruzione di sistemi fotovoltaici integrati negli edifici. Nel nostro approccio un concentratore solare è un pannello di PMMA che contiene e separa uno dall'altro i QD, la lastra di PMMA serve anche come guida per la luce emessa dal cristallo colloidale. Lo studio di questi concentratori ha permesso di verificare un'efficienza ottica  $> 10\%$  e un fattore di concentrazione effettiva di 4.4. Questi risultati dimostrano la notevole potenzialità dei QD ad elevati Stokes-shift nella fabbricazione di concentratori solari luminescenti di grande superficie. Alcuni nanocompositi a base titania e la poli(2-etil-2-ossazolina) hanno dimostrato interessanti proprietà di vernice protettiva su dipinti moderni, attualmente sono in corso prove da parte di un team di restauratori al fine di testarne la reale applicabilità. Altre attività hanno riguardato la preparazione di nanocompositi ad alta costante dielettrica utilizzando nanocristalli di titania su cui si sono fatte crescere catene di polistirene mediante polimerizzazione radicalica vivente RAFT.

Un'attività più recente è quella di sviluppare nuovi materiali a partire da scarti dell'industria alimentare. Insieme ad IIT è stata sviluppata una tecnica “green” per ottenere film cellulose con ottime proprietà fisico-meccaniche utilizzando scarti di prezzemolo ed altri ortaggi. Attualmente l'attività è focalizzata sulla modifica di nano particelle di cheratina ottenuta dalle penne e piume scarto dell'industria avicola mediante polimerizzazione RAFT con approccio “grafting-from.” Questa attività è stata finanziata da Fondazione Cariplo mediante il bando Economia Circolare.

Infine il Prof. Simonutti si è infine dedicato allo sviluppo di nuove metodiche TD-NMR dedicate alla caratterizzazione dei polimeri mediante tecniche multiple quantum. In particolare ci si è posto l'obiettivo di avere un bouquet di metodi capaci di determinare alcuni parametri fondamentali di un materiale polimerico: temperatura di transizione vetrosa, frazione di fase rigida (vetrosa o cristallina), grado di reticolazione in un elastomero vulcanizzato, frazione di polimero immobilizzato su un carica inorganica, cinetica di cristallizzazione. Tecniche TD-NMR sono state utilizzate anche per sviluppare metodi di differenziazione forense di guanti o particelle di gomma piuma (tipicamente a base poliuretanic) ritrovati sulla scena del crimine. Inoltre ha utilizzato la tecnica  $^{129}\text{Xe}$ -NMR per la prima volta per lo studio della nano strutturazione di liquidi ionici, in particolare nel caso di miscele.

Attualmente sono in essere le seguenti collaborazioni: 1) Prof. H-J Butt, Max Planck Institute for Polymer Research di Mainz, per la caratterizzazione di blend polimerici e copolimeri a blocchi con tecniche di microscopia confocale e AFM; 2) Dott. L. Di Trizio, IIT di Genova, per la sintesi di nuovi nanocristalli da utilizzarsi in nanocompositi trasparenti; 3) Dott. G. Perotto, IIT Genova, per la sintesi di nuovi materiali polimerici da scarti dell'industria alimentari; 4) Prof. E. R. de La Rie, Università di Amsterdam e National Gallery of Arts di Washington e Prof. O. Chiantore, Università di Torino, relativamente allo sviluppo di nuovi materiali per il restauro di dipinti; 5) Dott. J. López Valentín, ICTP-CSIC di Madrid, per lo sviluppo di nuove sequenze TD-NMR; 6) Prof. T. Welton, Imperial College di Londra, per lo studio mediante  $^{129}\text{Xe}$  NMR della nano strutturazione di liquidi ionici; 7) Dott. H.N. Cheng, ARS-USDA New Orleans, per la caratterizzazione mediante  $^{129}\text{Xe}$  NMR di carboni ottenuti da gusci di mandorle e noci pecan; 8) Prof. F. Picchioni, Università di Groningen, caratterizzazione di elastomeri termo reversibili; 9) Prof. M. Stenzel Centre for Advanced Macromolecular Design (CAMD), School of Chemistry, University of New South Wales, Sydney, Sintesi RAFT di copolimeri a blocchi contenenti zuccheri; 10) Prof. B.C. Benicewicz, University of Southern Carolina, Sintesi di nano compositi polimerici. 11) Prof. Ian Nichols, Linneaus University, molecularly imprinted polymers per separazione di molecole bioattive.

Nel febbraio 2015 il Prof. Simonutti insieme a suoi due collaboratori, Dott. Michele Mauri e Dott. Alberto Bianchi, ha fondato lo spin-off universitario Graftonica. Graftonica sviluppa, produce e commercializza additivi nanotecnologici, per rispondere alle esigenze in continua evoluzione del

settore trasformativo della gomma e della plastica. A giugno 2019 andrà in produzione, da parte di Vesta design, la prima linea di lampade sviluppata utilizzando gli additivi di Graftonica  
In data 31/3/2017 il Prof. Simonutti ha ricevuto l'abilitazione a Professore di I fascia per il settore concorsuale 03/C2.

Da Aprile 2016 ad Aprile 2019 il Prof. Simonutti ha fatto parte del consiglio direttivo dell'Associazione Italiana di Scienza e Tecnologia della Macromolecole (AIM).

Il Prof Simonutti è il "Chair" della conferenza ISPAC 2020 che si terrà a Giugno 2020 a Como, facente parte della serie di conferenze "The International Symposium on Polymer Analysis and Characterization" ISPAC.

## **Attività didattica**

Titolare dei seguenti insegnamenti:

Corso di Laurea in Scienza dei Materiali (V.O.)

**2000-2001:** Laboratorio di Chimica dei Materiali I (CHIM/04)

**2001-2002:** Laboratorio di Chimica dei Materiali I (CHIM/04)

Corso di Laurea Triennale Scienza dei Materiali

**2001-2002:** Laboratorio di Chimica dei Materiali I (CHIM/04) 5 CFU

**2002-2003:** Laboratorio di Chimica dei Materiali I (CHIM/04) 5 CFU

**2003-2004:** Laboratorio di Chimica dei Materiali I (CHIM/04) 5 CFU

**2004-2005:** Laboratorio di Chimica dei Materiali I (CHIM/04) 5 CFU

**2005-2006:** Laboratorio di Chimica dei Materiali I (CHIM/04) 5 CFU

**2006-2007:** Laboratorio di Chimica dei Materiali I (CHIM/04) 5 CFU

**2007-2008:** Laboratorio di Chimica dei Materiali I (CHIM/04) 5 CFU

**2008-2009:** Laboratorio di Chimica dei materiali macromolecolari (CHIM/04) 4 CFU

**2009-2010:** Laboratorio di Chimica dei materiali macromolecolari (CHIM/04) 4 CFU

**2010-2011:** Laboratorio di Chimica dei materiali macromolecolari (CHIM/04) 4 CFU

Laboratorio di Tecnologia dei Materiali II (CHIM/04) 8 CFU

**2011-2012:** Laboratorio di Chimica dei Materiali Macromolecolari (CHIM/04) 4 CFU

Laboratorio di Tecnologia dei Materiali II (CHIM/04) 8 CFU

**2012-2013:** Chimica dei Materiali Organici e Polimerici (CHIM/04) 4 CFU

Laboratorio di Tecnologia dei Materiali II (CHIM/04) 8 CFU

**2013-2014** Chimica dei Materiali Polimerici (CHIM/04) 8 CFU

**2014-2015** Chimica dei Materiali Polimerici (CHIM/04) 8 CFU

**2015-2016** Chimica dei Materiali Polimerici (CHIM/04) 8 CFU

**2016-2017** Chimica dei Materiali Polimerici (CHIM/04) 8 CFU

**2017-2018** Chimica dei Materiali Polimerici (CHIM/04) 8 CFU

**2018-2019** Chimica dei Materiali Polimerici (CHIM/04) 8 CFU

Applicazioni Materiali Polimerici (CHIM/04) 6 CFU

### Corso di Laurea Triennale in Scienze e Tecnologie Chimiche

<b>2013-2014</b>	Chimica Analitica e Strumentale con Laboratorio (CHIM/01) 2 CFU
<b>2014-2015</b>	Chimica Analitica e Strumentale con Laboratorio (CHIM/01) 2 CFU
<b>2015-2016</b>	Chimica Analitica e Strumentale con Laboratorio (CHIM/01) 4 CFU
<b>2016-2017</b>	Chimica Analitica e Strumentale con Laboratorio (CHIM/01) 4 CFU
<b>2017-2018</b>	Chimica Analitica e Strumentale con Laboratorio (CHIM/01) 4 CFU
<b>2018-2019</b>	Chimica Analitica e Strumentale con Laboratorio (CHIM/01) 4 CFU

### Corso di Laurea Magistrale in Scienze e Tecnologie Chimiche

<b>2018-2019</b>	Chimica Organica delle Formulazioni (CHIM/06) 3 CFU
------------------	---

### Corso di Laurea Magistrale in Materials Science

<b>2016-2017</b>	Physical Characterization of Materials With Laboratory (FIS/01) 1CFU
<b>2017-2018</b>	Physical Characterization of Materials With Laboratory (FIS/01) 1CFU
<b>2018-2019</b>	Physical Characterization of Materials With Laboratory (FIS/01) 1CFU

### Master Universitario di II livello in Scienze e Tecnologie Cosmetiche

<b>2014-2015</b>	Nanomateriali (CHIM/04) 2CFU
------------------	------------------------------

### Dottorato in Scienza dei Materiali e Nanotecnologie

<b>2018-2019</b>	Chimica dei Polimeri 1CFU
------------------	---------------------------

### Dottorato in Ingegneria dei Materiali, Politecnico di Milano

<b>2018-2019</b>	Methods for the compositional analysis and characterization of materials 0.2 CFU
------------------	--

Altra attività didattica nei corsi: Chimica delle macromolecole, Chimica e Tecnologia dei Polimeri, Elementi di Materiali Polimerici , Laboratorio di Fisica dei Materiali II, Laboratorio di Solidi per Fisica, Laboratorio di Chimica Fisica.

Dal 2008 il Prof. Simonutti è stato tutor di 5 dottorandi in Scienza dei Materiali e 4 dottorandi in Nanotecnologie e Nanostrutture. Attualmente sta seguendo 1 dottorando in Scienza e Nanotecnologia dei Materiali. Di seguito sono riportati i nomi dei dottorandi con titolo della tesi e anno della discussione finale:

- 1) Dott.ssa Dagmara Trojanowska, Preparation of new keratin based bioplastics, 2022
- 2) Dott.ssa Denise Besghini, Advanced TD NMR techniques for the characterization of rubber based materials, 2021.
- 3) Dott. Massimo Tawfilas, Fabrication of High Reflective Index Polymer Nanocomposites, 2019.

- 4) Dott.ssa Daniela Bertani, Synthesis of novel biocompatible block copolymers for drug delivery, 2018.
- 5) Dott. Matteo Farina: Characterization of dishomogeneity of crosslink density in polybutadiene and polyisoprene polymer blends, 2016.
- 6) Dott. Simone Bonetti: Multiphase polymer-based functional nanocontainers: synthesis and characterization, 2016.
- 7) Dott. Murali Krisna Dibbanti: Precise determination of crosslink density in sulphur vulcanized diene rubbers by Time Domain NMR, 2015.
- 8) Dott. Alberto Bianchi: Living radical polymerization for the preparation of innovative macromolecular architectures, 2013.
- 9) Dott. Luca De Trizio: Polymer nanocomposites for illumination: towards warm white light, 2013.
- 10) Dott. Annalisa Colombo: Synthesis and characterization of TiO<sub>2</sub> polymeric nanocomposites with tailorable optical properties, 2012.
- 11) Dott. Tommaso Crisenza: Thermoplastic elastomers from chlorinated polyethylene/nylon terpolyamide blends, 2012.

Inoltre è stato relatore di 9 Tesi di Laurea Magistrale in Scienza dei Materiali e di 15 Tesi di Laurea Triennale in Scienza dei Materiali e 7 Tesi di Laurea Triennale in Scienze e Tecnologie Chimiche.

**Partecipazione scientifica a progetti di ricerca internazionali e nazionali, ammessi al finanziamento sulla base di bandi competitivi che prevedano la revisione tra pari**

- 1) Fondazione CARIPLO, 2018-1005, Progetto PROTHEIFORM, PROtein THERmoplastIcs from FOod Refuse for food packaging Materials: responsabile del progetto. Molecular Foundry, Lawrence Berkeley National Laboratory (US), 2013, Project #1630, Synthesis of inorganic nanoparticles with controlled shape and dimensions to be used as diffusers in transparent polymeric nanocomposites: responsabile del progetto.
- 2) Regione Lombardia, POR FESR 2007-2013, Progetto 13888811 WILITE: responsabile scientifico di unità.
- 3) Fondazione CARIPLO, 2010-0564, Progetto LUMIPHOTO: partecipante al programma.
- 4) Fondazione CARIPLO, 2008-2523, Progetto NANOTOP, Transparent Polymer NANOcomposites with Tailorable Optical Properties: Fabrication and Characterization: responsabile del progetto.
- 5) PRIN 2008, 2008CSNZFR\_002, Fotosensibilizzatori ed elettroliti organometallici ed organici, molecolari e polimerici, per celle solari a sensibilizzazione da cromoforo: componenti eteroaromatiche donatrici/accettrici e ramificazione strutturale 3D per la modulazione delle proprietà ottiche ed elettroniche: Partecipante al Programma.
- 6) PRIN 2004 2004032090\_004, Progettazione, preparazione e caratterizzazione di materiali nanostrutturati contenenti cromofori organici: responsabile scientifico unità.
- 7) PRIN 2002 2002032929\_001, Sintesi e caratterizzazione di nuovi catalizzatori di polimerizzazione e di nuovi materiali polimerici idrocarburici: partecipante al programma.
- 8) PRIN 2000 MM03282182\_004, Catalizzatori a base di metalli di transizione per la polimerizzazione di dieni e cicloolefine - Studio dei fattori che influenzano la stereoselettività della polimerizzazione; studio conformazionale dei polimeri ottenuti con NMR dello stato solido: partecipante al programma.

## **Partecipazione a enti o istituti di ricerca, esteri e internazionali, di alta qualificazione**

University of California Berkeley, Prof. A. Pines, 1/2007- 2/2007

University of California Berkeley, Prof. A. Pines, 10/2007-11/2007

Max Plank Institute for Polymer Science, Mainz, AK Prof. H.-J. Butt, numerosi periodi di ricerca dal 2012.

## **Attività di Trasferimento Tecnologico**

Nel febbraio 2015 il Prof. Simonutti insieme a suoi due collaboratori, Dott. Michele Mauri e Dott. Alberto Bianchi, ha fondato lo spin-off universitario Graftonica. Graftonica sviluppa, produce e commercializza additivi nanotecnologici, per rispondere alle esigenze in continua evoluzione del settore trasformativo della gomma e della plastica. A giugno 2019 è andata in produzione, da parte di Vesta design, la prima linea di lampade sviluppata utilizzando gli additivi di Graftonica

Oltre ai finanziamenti ottenuti da progetti PRIN, Fondazione Cariplo e Regione Lombardia il Prof. Simonutti ha raccolto circa 600.000 EURO in contratti di ricerca con importanti realtà industriali internazionali e locali. Di seguito sono riportate le aziende coinvolte e le tematiche studiate:

- 1) Giacomini (San Maurizio d'Opaglio): Sviluppo di nuovi nanocompositi per sistemi di distribuzione dell'acqua calda.
- 2) Antenna Company (Eindhoven, NL): sviluppo di materiali dielettrici polimerici.
- 3) Intercos (Agrate Brianza): sviluppo di nuovi blend polimerici per smalti per unghie.
- 4) SAES Getters (Lainate):sviluppo di nanocompositi polimerici come assorbitori di acqua in schermi OLED.
- 5) Tetra Pak (Lund, SE): caratterizzazione di film polimerici a base di alfa-olefine.
- 6) Centro Ricerche FIAT (CRF, Torino) Caratterizzazione mediante TD-NMR di gomme per automotive.
- 7) Geolog (San Giuliano Milanese) Caratterizzazione mediante TD-NMR di carote da prospezioni petrolifere.
- 8) Trelleborg Coated Systems (Lodi Vecchio) Sviluppo di metodi NMR per la determinazione del grado di reticolazione in blanket per stampa offset.
- 9) Pirelli (Milano): Sviluppo di metodi NMR per la determinazione del grado di reticolazione in gomme vulcanizzate.
- 10) Polimeri Europa (attualmente Versalis, Ravenna): Caratterizzazione della morfologia in gomme EPDM.
- 11) Vernay (Asti): Sviluppo di metodi NMR per la determinazione del grado di reticolazione in gomme siliconiche e fluorurate.

## **Attività Editoriale e di Organizzazione di convegni**

Da Aprile 2016 ad Aprile 2019 il Prof. Simonutti ha fatto parte del consiglio direttivo dell'Associazione Italiana di Scienza e Tecnologia della Macromolecole (AIM).

Ha organizzato la giornata tecnologica "Elastomeri 4.0" durante il PLAST 2018 (30/5/2018)

Il Prof Simonutti è il "Chair" della conferenza ISPAC 2020 che si terrà a Giugno 2020 a Como, facente parte della serie di conferenze "The International Symposium on Polymer Analysis and Characterization" ISPAC.

Partecipa all'editorial board di Polymers-Mdpi, giornale per cui ha curato la special issue "NMR in Polymer Science"

## Elenco Completo delle Pubblicazioni

[1-96]

- 1 Weber, C. C., Brooks, N. J., Castiglione, F., Mauri, M., Simonutti, R., Mele, A., Welton, T. 2019 On the structural origin of free volume in 1-alkyl-3-methylimidazolium ionic liquid mixtures: a SAXS and Xe-129 NMR study. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 5999-6010. (10.1039/c9cp00587k)
- 2 Meinardi, F., Ballabio, M., Yanai, N., Kimizuka, N., Bianchi, A., Mauri, M., Simonutti, R., Ronchi, A., Carnpione, M., Monguzzi, A. 2019 Quasi-thresholdless Photon Upconversion in Metal-Organic Framework Nanocrystals. *Nano Lett.* **19**, 2169-2177. (10.1021/acs.nanolett.9b00543)
- 3 Abbas, Z. M., Tawfilas, M., Khani, M. M., Golian, K., Marsh, Z. M., Jhalaria, M., Simonutti, R., Stefik, M., Kumar, S. K., Benicewicz, B. C. 2019 Reinforcement of polychloroprene by grafted silica nanoparticles. *Polymer*. **171**, 96-105. (<https://doi.org/10.1016/j.polymer.2019.03.031>)
- 4 Selli, D., Tawfilas, M., Mauri, M., Simonutti, R., Di Valentin, C. 2019 Optimizing PEGylation of TiO<sub>2</sub> Nanocrystals through a Combined Experimental and Computational Study. *Chem. Mat.* **31**, 7531-7546. (10.1021/acs.chemmater.9b02329)
- 5 Piloni, A., Simonutti, R., Stenzel, M. H. 2019 The effect of cationic groups on the stability of 19F MRI contrast agents in nanoparticles. *Journal of Polymer Science, Part A: Polymer Chemistry*. **57**, 1994-2001. (10.1002/pola.29387)
- 6 Besghini, D., Mauri, M., Simonutti, R. 2019 Time domain NMR in polymer science: From the laboratory to the industry. *Applied Sciences (Switzerland)*. **9**, (10.3390/app9091801)
- 7 Perotto, G., Ceseracciu, L., Simonutti, R., Paul, U. C., Guzman-Puyol, S., Tran, T.-N., Bayer, I. S., Athanassiou, A. 2018 Bioplastics from vegetable waste via an eco-friendly water-based process. *Green Chemistry*. **20**, 894-902. (10.1039/c7gc03368k)
- 8 Mauri, M., Floudas, G., Simonutti, R. 2018 Local order and dynamics of nanoconstrained ethylene-butylene chain segments in SEBS. *Polymers*. **10**, (10.3390/polym10060655)
- 9 Mauri, M., Ponting, M., Causin, V., Simonutti, R., Pesciotti, F. 2018 Morphological reorganization and mechanical enhancement in multilayered polyethylene/polypropylene films by layer multiplication or mild annealing. *J. Polym. Sci. Pt. B-Polym. Phys.* **56**, 520-531. (10.1002/polb.24561)
- 10 Gabrielli, L., Origgi, D., Zampella, G., Bertini, L., Bonetti, S., Vaccaro, G., Meinardi, F., Simonutti, R., Cipolla, L. 2018 Towards hydrophobic carminic acid derivatives and their incorporation in polyacrylates. *Royal Society open science*. **5**, 172399. (10.1098/rsos.172399)
- 11 Salanti, A., Zoia, L., Simonutti, R., Orlandi, M. 2018 Epoxidized Lignin Derivatives as Bio-based Cross-linkers Used in the Preparation of Epoxy Resins. *BioResources*. **13**, 2374-2396. (10.15376/biores.13.2.2374-2396)
- 12 Meinardi, F., Ehrenberg, S., Dharmo, L., Carulli, F., Mauri, M., Bruni, F., Simonutti, R., Kortshagen, U., Brovelli, S. 2017 Highly efficient luminescent solar concentrators based on earth-abundant indirect-bandgap silicon quantum dots. *Nat. Photonics*. **11**, 177+. (10.1038/nphoton.2017.5)
- 13 Vismara, E., Bongio, C., Coletti, A., Edelman, R., Serafini, A., Mauri, M., Simonutti, R., Bertini, S., Urso, E., Assaraf, Y. G., *et al.* 2017 Albumin and Hyaluronic Acid-Coated Superparamagnetic Iron Oxide Nanoparticles Loaded with Paclitaxel for Biomedical Applications. *Molecules*. **22**, (10.3390/molecules22071030)
- 14 Brooks, N. J., Castiglione, F., Doherty, C. M., Dolan, A., Hill, A. J., Hunt, P. A., Matthews, R. P., Mauri, M., Mele, A., Simonutti, R., *et al.* 2017 Linking the structures, free volumes, and properties of ionic liquid mixtures. *Chem. Sci.* **8**, 6359-6374. (10.1039/c7sc01407d)
- 15 Polgar, L. M., Hagting, E., Raffa, P., Mauri, M., Simonutti, R., Picchioni, F., van Duin, M. 2017 Effect of Rubber Polarity on Cluster Formation in Rubbers Cross-Linked with Diels–Alder Chemistry. *Macromolecules*. (10.1021/acs.macromol.7b01541)

- 16 Monguzzi, A., Oertel, A., Braga, D., Riedinger, A., Kim, D. K., Knüsel, P. N., Bianchi, A., Mauri, M., Simonutti, R., Norris, D. J., *et al.* 2017 Photocatalytic Water-Splitting Enhancement by Sub-Bandgap Photon Harvesting. *ACS Applied Materials & Interfaces*. (10.1021/acsami.7b10829)
- 17 Monguzzi, A., Mauri, M., Frigoli, M., Pedrini, J., Simonutti, R., Larpent, C., Vaccaro, G., Sassi, M., Meinardi, F. 2016 Unraveling Triplet Excitons Photophysics in Hyper-Cross-Linked Polymeric Nanoparticles: Toward the Next Generation of Solid-State Upconverting Materials. *Journal of Physical Chemistry Letters*. **7**, 2779-2785. (10.1021/acs.jpcclett.6b01115)
- 18 Gherardi, F., Colombo, A., D'Arienza, M., Di Credico, B., Goidanich, S., Morazzoni, F., Simonutti, R., Toniolo, L. 2016 Efficient self-cleaning treatments for built heritage based on highly photo-active and well-dispersible TiO<sub>2</sub> nanocrystals. *Microchemical Journal*. **126**, 54-62. (10.1016/j.microc.2015.11.043)
- 19 Bonetti, S., Farina, M., Mauri, M., Koynov, K., Butt, H. J., Kappl, M., Simonutti, R. 2016 Core@shell Poly(n-butylacrylate)@polystyrene Nanoparticles: Baroplastic Force-Responsiveness in Presence of Strong Phase Separation. *Macromolecular rapid communications*. **37**, 584-589. (10.1002/marc.201500625)
- 20 Monguzzi, A., Mauri, M., Bianchi, A., Dibbanti, M. K., Simonutti, R., Meinardi, F. 2016 Solid-State Sensitized Upconversion in Polyacrylate Elastomers. *Journal of Physical Chemistry C*. **120**, 2609-2614. (10.1021/acs.jpcc.6b00223)
- 21 Farina, M., Mauri, M., Patriarca, G., Simonutti, R., Klasson, K. T., Cheng, H. N. 2016 <sup>129</sup>Xe NMR studies of morphology and accessibility in porous biochar from almond shells. *RSC Adv*. **6**, 103803-103810. (10.1039/c6ra18104j)
- 22 Tavazzi, S., Ferraro, L., Fagnola, M., Cozza, F., Farris, S., Bonetti, S., Simonutti, R., Borghesi, A. 2015 Mechanically triggered solute uptake in soft contact lenses. *Colloids and surfaces. B, Biointerfaces*. **130**, 16-22. (10.1016/j.colsurfb.2015.03.057)
- 23 Tadiello, L., D'Arienzo, M., Di Credico, B., Hanel, T., Matejka, L., Mauri, M., Morazzoni, F., Simonutti, R., Spirkova, M., Scotti, R. 2015 The filler-rubber interface in styrene butadiene nanocomposites with anisotropic silica particles: morphology and dynamic properties. *Soft Matter*. **11**, 4022-4033. (10.1039/c5sm00536a)
- 24 Gregori, M., Bertani, D., Cazzaniga, E., Orlando, A., Mauri, M., Bianchi, A., Re, F., Sesana, S., Minniti, S., Francolini, M., *et al.* 2015 Investigation of Functionalized Poly (N,N-dimethylacrylamide)-block-polystyrene Nanoparticles As Novel Drug Delivery System to Overcome the Blood-Brain Barrier In Vitro. *Macromolecular Bioscience*. **15**, 1687-1697. (10.1002/mabi.201500172)
- 25 Dibbanti, M. K., Mauri, M., Mauri, L., Medaglia, G., Simonutti, R. 2015 Probing small network differences in sulfur-cured rubber compounds by combining nuclear magnetic resonance and swelling methods. *Journal of Applied Polymer Science*. **132**, (10.1002/app.42700)
- 26 Meinardi, F., McDaniel, H., Carulli, F., Colombo, A., Velizhanin, K. A., Makarov, N. S., Simonutti, R., Klimov, V. I., Brovelli, S. 2015 Highly efficient large-area colourless luminescent solar concentrators using heavy-metal-free colloidal quantum dots. *Nature Nanotechnology*. **10**, 878-885. (10.1038/nnano.2015.178)
- 27 Mauri, M., Farina, M., Patriarca, G., Simonutti, R., Klasson, K. T., Cheng, H. N. 2015 <sup>129</sup>Xe NMR Studies of Pecan Shell-Based Biochar and Structure-Process Correlations. *International Journal of Polymer Analysis and Characterization*. **20**, 119-129. (10.1080/1023666x.2015.979038)
- 28 Colombo, A., Gherardi, F., Goidanich, S., Delaney, J. K., de la Rie, E. R., Ubaldi, M. C., Toniolo, L., Simonutti, R. 2015 Highly transparent poly(2-ethyl-2-oxazoline)-TiO<sub>2</sub> nanocomposite coatings for the conservation of matte painted artworks. *RSC Adv*. **5**, 84879-84888. (10.1039/c5ra10895k)
- 29 Manfredi, N., Bianchi, A., Causin, V., Ruffo, R., Simonutti, R., Abbotto, A. 2014 Electrolytes for Quasi Solid-State Dye-Sensitized Solar Cells Based on Block Copolymers. *J. Polym. Sci. Pol. Chem*. **52**, 719-727. (10.1002/pola.27055)

- 30 Meinardi, F., Colombo, A., Velizhanin, K. A., Simonutti, R., Lorenzon, M., Beverina, L., Viswanatha, R., Klimov, V. I., Brovelli, S. 2014 Large-area luminescent solar concentrators based on 'Stokes-shift-engineered' nanocrystals in a mass-polymerized PMMA matrix. *Nat. Photonics*. **8**, 392-399. (10.1038/nphoton.2014.54)
- 31 Bianchi, A., Mauri, M., Bonetti, S., Koynov, K., Kappl, M., Lieberwirth, I., Butt, H.-J., Simonutti, R. 2014 Hierarchical Self-Assembly of PDMA-b-PS Chains into Granular Nanoparticles: Genesis and Fate. *Macromolecular rapid communications*. **35**, 1994-1999. (10.1002/marc.201400414)
- 32 Saielli, G., Bagno, A., Castiglione, F., Simonutti, R., Mauri, M., Mele, A. 2014 Understanding Cage Effects in Imidazolium Ionic Liquids by (129)Xe NMR: MD Simulations and Relativistic DFT Calculations. *The journal of physical chemistry. B*. **118**, 13963-13968. (10.1021/jp511207s)
- 33 Bianchi, A., Mauri, M., Bonetti, S., Koynov, K., Kappl, M., Lieberwirth, I., Butt, H.-J., Simonutti, R. 2014 Macromol. Rapid commun. 23/2014. *Macromolecular rapid communications*. **35**, 2044. (10.1002/marc.201470086)
- 34 Colombo, A., Simonutti, R. 2014 Polymer based nanocomposites with tailorable optical properties. *Nanophotonic Materials Xi*. **9161**, (10.1117/12.2062388)
- 35 Crippa, M., Bianchi, A., Cristofori, D., D'Arienzo, M., Merletti, F., Morazzoni, F., Scotti, R., Simonutti, R. 2013 High dielectric constant rutile-polystyrene composite with enhanced percolative threshold. *Journal of Materials Chemistry C*. **1**, 484-492.
- 36 Colombo, A., Tassone, F., Santolini, F., Contiello, N., Gambirasio, A., Simonutti, R. 2013 Nanoparticle-doped large area PMMA plates with controlled optical diffusion. *Journal of Materials Chemistry C*. **1**, 2927-2934. (10.1039/c3tc00767g)
- 37 Castiglione, F., Simonutti, R., Mauri, M., Mele, A. 2013 Cage-like local structure of ionic liquids revealed by a129Xe chemical shift. *Journal of Physical Chemistry Letters*. **4**, 1608-1612.
- 38 De Trizio, L., Buonsanti, R., Schimpf, A. M., Llordes, A., Gamelin, D. R., Simonutti, R., Milliron, D. J. 2013 Nb-Doped Colloidal TiO<sub>2</sub> Nanocrystals with Tunable Infrared Absorption. *Chem. Mat.* **25**, 3383-3390. (10.1021/cm402396c)
- 39 Mauri, M., Dibbanti, M. K., Calzavara, M., Mauri, L., Simonutti, R., Causin, V. 2013 Time domain nuclear magnetic resonance: a key complementary technique for the forensic differentiation of foam traces. *Analytical Methods*. **5**, 4336-4344. (10.1039/c3ay40330k)
- 40 Salice, P., Mauri, M., Castellino, M., De Marco, M., Bianchi, A., Virga, A., Tagliaferro, A., Simonutti, R., Menna, E. 2013 Synthesis and characterisation of a trithiocarbonate for the decoration of carbon nanostructures. *Chemical Communications*. **49**, 8048-8050. (10.1039/c3cc44700f)
- 41 Vaccaro, G., Bianchi, A., Mauri, M., Bonetti, S., Meinardi, F., Sanguineti, A., Simonutti, R., Beverina, L. 2013 Direct monitoring of self-assembly of copolymeric micelles by a luminescent molecular rotor. *Chemical Communications*. **49**, 8474-8476. (10.1039/c3cc44590a)
- 42 Monguzzi, A., Bianchi, F., Bianchi, A., Mauri, M., Simonutti, R., Ruffo, R., Tubino, R., Meinardi, F. 2013 High Efficiency Up-Converting Single Phase Elastomers for Photon Managing Applications. *Adv. Energy Mater.* **3**, 680-686. (10.1002/aenm.201200897)
- 43 Mauri, M., Mauri, L., Floudas, G., Simonutti, R. 2013 Dynamics and crystallization of poly(ethylene butene) nanoconfined in SEBS. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*. **245**,
- 44 Crisenza, T., Butt, H.-J., Koynov, K., Simonutti, R. 2012 Direct 3D Visualization of the Phase-Separated Morphology in Chlorinated Polyethylene/Nylon Terpolyamide Based Thermoplastic Elastomers. *Macromolecular Rapid Communications*. **33**, 114-119. (10.1002/marc.201100622)
- 45 De Trizio, L., Figuerola, A., Manna, L., Genovese, A., George, C., Brescia, R., Saghi, Z., Simonutti, R., Van Huis, M., Falqui, A. 2012 Size-Tunable, Hexagonal Plate-like Cu(3)P and Janus-like Cu-Cu(3)P Nanocrystals. *ACS nano*. **6**, 32-41.

- 46 Mauri, M., Simonutti, R. 2012 Hyperpolarized Xenon Nuclear Magnetic Resonance (NMR) of Building Stone Materials. *Materials*. **5**, 1722-1739. (10.3390/ma5091722)
- 47 De Trizio, L., Prato, M., Genovese, A., Casu, A., Povia, M., Simonutti, R., Alcocer, M. J. P., D'Andrea, C., Tassone, F., Manna, L. 2012 Strongly Fluorescent Quaternary Cu-In-Zn-S Nanocrystals Prepared from Cu<sub>1-x</sub>InS<sub>2</sub> Nanocrystals by Partial Cation Exchange. *Chem. Mat.* **24**, 2400-2406. (10.1021/cm301211e)
- 48 Sanguineti, A., Monguzzi, A., Vaccaro, G., Meinardi, F., Ronchi, E., Moret, M., Cosentino, U., Moro, G., Simonutti, R., Mauri, M., *et al.* 2012 NIR emitting ytterbium chelates for colourless luminescent solar concentrators. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, 6452-6455. (10.1039/c2cp40791d)
- 49 Colombo, A., Tassone, F., Mauri, M., Salerno, D., Delaney, J. K., Palmer, M. R., De La Rie, R., Simonutti, R. 2012 Highly transparent nanocomposite films from water-based poly(2-ethyl-2-oxazoline)/TiO<sub>2</sub> dispersions. *RSC Adv.* **2**, 6628-6636. (10.1039/c2ra20571h)
- 50 Mauri, M., Mauri, L., Causin, V., Simonutti, R. 2011 A method based on time domain nuclear magnetic resonance for the forensic differentiation of latex gloves. *Analytical Methods*. **3**, 1802-1809. (10.1039/c1ay05131h)
- 51 Simonutti, R., Colombo, A., Boldrini, C. L. 2011 Surface modification of titania nanoparticles as characterized by MAS NMR. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*. **241**,
- 52 Simonutti, R., Harel, E., Garmann, R. 2010 Magnetic resonance imaging of high impact polypropylene particles. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*. **239**,
- 53 Comotti, A., Bracco, S., Ferretti, L., Mauri, M., Simonutti, R., Sozzani, P. 2007 A single-crystal imprints macroscopic orientation on xenon atoms. *Chemical Communications*. 350-352. (10.1039/b612002d)
- 54 Sozzani, P., Bracco, S., Comotti, A., Simonutti, R., Valsesia, P., Sakamoto, Y., Terasaki, O. 2006 Complete shape retention in the transformation of silica to polymer micro-objects. *Nature Materials*. **5**, 545-551. (10.1038/nmat1659)
- 55 Sozzani, P., Bracco, S., Comotti, A., Mauri, M., Simonutti, R., Valsesia, P. 2006 Nanoporosity of an organo-clay shown by hyperpolarized xenon and 2D NMR spectroscopy. *Chemical Communications*. 1921-1923. (10.1039/b602040b)
- 56 Simonutti, R., Bracco, S., Comotti, A., Mauri, M., Sozzani, P. 2006 Continuous flow hyperpolarized Xe-129 NMR for studying porous polymers and blends. *Chem. Mat.* **18**, 4651-4657. (10.1021/cm060499h)
- 57 Becker, J., Comotti, A., Simonutti, R., Sozzani, P., Saalwachter, K. 2005 Molecular motion of isolated linear alkanes in nanochannels. *Journal of Physical Chemistry B*. **109**, 23285-23294. (10.1021/jp054795d)
- 58 Sozzani, P., Bracco, S., Comotti, A., Ferretti, L., Simonutti, R. 2005 Methane and carbon dioxide storage in a porous van der Waals crystal. *Angewandte Chemie-International Edition*. **44**, 1816-1820. (10.1002/anie.200461704)
- 59 Sozzani, P., Bracco, S., Comotti, A., Simonutti, R. 2005 Motional phase disorder of polymer chains as crystallized to hexagonal lattices. In *Interphases and Mesophases in Polymer Crystallization II*. (ed. eds. A. Abe), pp. 153-177
- 60 Brustolon, M., Barbon, A., Bortolus, M., Maniero, A. L., Sozzani, P., Comotti, A., Simonutti, R. 2004 Dynamics of alkoxy-oligothiophene ground and excited states in nanochannels. *Journal of the American Chemical Society*. **126**, 15512-15519. (10.1021/ja046804m)
- 61 Sozzani, P., Comotti, A., Bracco, S., Simonutti, R. 2004 Cooperation of multiple CH center dot center dot pi interactions to stabilize polymers in aromatic nanochannels as indicated by 2D solid state NMR. *Chemical Communications*. 768-769. (10.1039/b316855g)
- 62 Sozzani, P., Comotti, A., Bracco, S., Simonutti, R. 2004 A family of supramolecular frameworks of polyconjugated molecules hosted in aromatic nanochannels. *Angewandte Chemie-International Edition*. **43**, 2792-2797. (10.1002/anie.200353479)

- 63 Sozzani, P., Bracco, S., Comotti, A., Simonutti, R., Camurati, I. 2003 Stoichiometric compounds of magnesium dichloride with ethanol for the supported Ziegler-Natta catalysis: First recognition and multidimensional MAS NMR study. *Journal of the American Chemical Society*. **125**, 12881-12893. (10.1021/ja034630n)
- 64 Macchi, G., Meinardi, F., Simonutti, R., Sozzani, P., Tubino, R. 2003 Novel organic-inorganic nanophase material: a photophysical study. *Chemical Physics Letters*. **379**, 126-131. (10.1016/j.cplett.2003.08.028)
- 65 Bracco, S., Comotti, A., Simonutti, R., Sozzani, P. 2003 Polymer/MCM-41 nanocomposites obtained by in-situ polymerization as characterized by solid state NMR. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*. **225**, U630-U630.
- 66 Simonutti, R., Mauri, M., Bracco, S., Comotti, A., Sozzani, P. 2003 Mobility of linear polymer chains in TPP nanochannels. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*. **225**, U631-U631.
- 67 Sozzani, P., Simonutti, R., Bracco, S., Comotti, A. 2003 Extended polymeric interfaces studied by H-1-C-13 HETCOR applying Lee Goldburg homonuclear decoupling. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*. **225**, U637-U637.
- 68 Simonutti, R., Comotti, A., Bracco, S., Simonelli, A., Sozzani, P. 2002 Nanoporous silica grown in organic media: Absorption and NMR characterization. *Chem. Mat.* **14**, 3377-3381. (10.1021/cm0211709)
- 69 Simonutti, R., Mariani, A., Sozzani, P., Bracco, S., Piacentini, M., Russo, S. 2002 Poly(p-phenyleneterephthalamide)-based nanocomposites obtained by matrix polycondensation. Synthesis and solid-state NMR characterization. *Macromolecules*. **35**, 3563-3568. (10.1021/ma010007g)
- 70 Bracco, S., Comotti, A., Simonutti, R., Camurati, I., Sozzani, P. 2002 Low-temperature crystallization of ethylene-ran-propylene copolymers: Conformational rearrangement of sequences during the formation of the aggregates. *Macromolecules*. **35**, 1677-1684. (10.1021/ma011475t)
- 71 Sozzani, P., Comotti, A., Simonutti, R., Bracco, S., Simonelli, A. 2002 Strength from motion in crystals: the example of supramolecular adducts. *Strength from Weakness: Structural Consequences of Weak Interactions in Molecules, Supermolecules, and Crystals. Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop*.
- 72 Bolognesi, A., Porzio, W., Provasoli, A., Botta, C., Comotti, A., Sozzani, P., Simonutti, R. 2001 Structural and thermal behavior of poly(3-octylthiophene): a DSC, C-13 MAS NMR, XRD, photoluminescence, and Raman scattering study. *Macromolecular Chemistry and Physics*. **202**, 2586-2591. (10.1002/1521-3935(20010801)202:12<2586::aid-macp2586>3.0.co;2-v)
- 73 Comotti, A., Simonutti, R., Bracco, S., Castellani, L., Sozzani, P. 2001 Simultaneous crystallization of isotactic and syndiotactic sequences of polypropylene. *Macromolecules*. **34**, 4879-4885. (10.1021/ma002146o)
- 74 Simonutti, R., Comotti, A., Bracco, S., Sozzani, P. 2001 Surfactant organization in MCM-41 mesoporous materials as studied by C-13 and Si-29 solid-state NMR. *Chem. Mat.* **13**, 771-777. (10.1021/cm001088i)
- 75 Meersmann, T., Logan, J. W., Simonutti, R., Caldarelli, S., Comotti, A., Sozzani, P., Kaiser, L. G., Pines, A. 2000 Exploring single-file diffusion in one-dimensional nanochannels by laser-polarized Xe-129 NMR spectroscopy. *Journal of Physical Chemistry A*. **104**, 11665-11670. (10.1021/jp002322v)
- 76 Vittoria, V., Guadagno, L., Comotti, A., Simonutti, R., Auriemma, F., De Rosa, C. 2000 Mesomorphic form of syndiotactic polypropylene. *Macromolecules*. **33**, 6200-6204. (10.1021/ma000373k)
- 77 Logan, J. W., Meersmann, T., Simonutti, R., Calderelli, S., Kaiser, L., Pines, A. 2000 Advances of optically polarized noble gas NMR in materials. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*. **219**, U331-U331.

- 78 Meersmann, T., Logan, J. W., Simonutti, R., Caldarelli, S., Kaiser, L., Pines, A. 2000 1-D gas-phase dynamics in nanochannels. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*. **219**, U337-U337.
- 79 Simonutti, R., Sozzani, P., Bracco, S., Comotti, A. 2000 Solid-state NMR characterization of polymer chains as confined to aromatic nanochannels. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*. **219**, U479-U479.
- 80 Sozzani, P., Comotti, A., Simonutti, R., Meersmann, T., Logan, J. W., Pines, A. 2000 A porous crystalline molecular solid explored by hyperpolarized xenon. *Angewandte Chemie-International Edition*. **39**, 2695-2698. (10.1002/1521-3773(20000804)39:15<2695::aid-anie2695>3.0.co;2-m)
- 81 Torri, G., Cosentino, C., Delben, F., Simonutti, R., Sozzani, P. 1999 Novel cellulosic ethers with low degrees of substitution - II. Magic angle spinning NMR study. *Carbohydrate Polymers*. **40**, 125-135. (10.1016/s0144-8617(99)00049-1)
- 82 Comotti, A., Simonutti, R., Catel, G., Sozzani, P. 1999 Isolated linear alkanes in aromatic nanochannels. *Chem. Mat.* **11**, 1476-1483. (10.1021/cm980630o)
- 83 Simonutti, R., Comotti, A., Negroni, F., Sozzani, P. 1999 C-13 and Si-29 solid-state NMR of rubber-silica composite materials. *Chem. Mat.* **11**, 822-828. (10.1021/cm9807539)
- 84 Comotti, A., Simonutti, R., Stramare, S., Sozzani, P. 1999 C-13 and P-31 MAS NMR investigations of spirocyclotriphosphazene nanotubes. *Nanotechnology*. **10**, 70-76. (10.1088/0957-4484/10/1/014)
- 85 Comotti, A., Gallazzi, M. C., Simonutti, R., Sozzani, P. 1998 C-13 and P-31 magic-angle spinning nuclear magnetic resonance spectroscopy of tris(2,3-naphthalenedioxy)cyclotriphosphazene inclusion compounds. *Chem. Mat.* **10**, 3589-3596. (10.1021/cm980338g)
- 86 Comotti, A., Simonutti, R., Sozzani, P. 1997 Morphology of the poly(vinyl alcohol) poly(vinyl acetate) copolymer in macrodefect-free composites: a C-13 magic-angle-spinning nuclear magnetic resonance and H-1 spin-diffusion study. *Journal of Materials Science*. **32**, 4237-4245. (10.1023/a:1018695000769)
- 87 Simonutti, R., Comotti, A., Sozzani, P. 1996 Mesomorphic behavior of polydiethylphosphazenes as described by C-13, N-14, and H-2 NMR. *Journal of Inorganic and Organometallic Polymers*. **6**, 313-324. (10.1007/bf01062512)
- 88 Comotti, A., Simonutti, R., Sozzani, P. 1996 Hydrated calcium silicate and poly(vinyl alcohol): Nuclear spin propagation across heterogeneous interfaces. *Chem. Mat.* **8**, 2341-2348. (10.1021/cm9601603)
- 89 Sozzani, P., Simonutti, R., Comotti, A. 1996 Chirality of flexible chains in the bulk by MAS NMR. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*. **212**, 53-POLY.
- 90 Simonutti, R., Veeman, W. S., Ruhnau, F. C., Gallazzi, M. C., Sozzani, P. 1996 Mobility of side chains in poly(diethylphosphazene) as studied by H-1/C-13/N-14 triple-resonance solid-state NMR. *Macromolecules*. **29**, 4958-4962. (10.1021/ma9514939)
- 91 Kosikova, B., Hricovini, M., Simonutti, R. 1996 C-13 NMR study of solid-state reaction of cellulose with lignin monomers. *Holzforschung*. **50**, 335-341. (10.1515/hfsg.1996.50.4.335)
- 92 Sozzani, P., Simonutti, R., Comotti, A. 1996 Dynamics of linear alkanes of different chain-length in nanotubes. *Molecular Crystals and Liquid Crystals Science and Technology Section a-Molecular Crystals and Liquid Crystals*. **276**, A299-A313.
- 93 Meille, S. V., Farina, A., Gallazzi, M. C., Sozzani, P., Simonutti, R., Comotti, A. 1995 POLYMORPHISM IN POLY(DIETHYLPHOSPHAZENE) AND ITS CYCLIC TRIMER - A MAS NMR AND X-RAY-DIFFRACTION STUDY. *Macromolecules*. **28**, 1893-1902. (10.1021/ma00110a025)
- 94 Sozzani, P., Simonutti, R., Comotti, A. 1995 AMORPHOUS PHASE AND INTERPHASE ORGANIZATION OF SYNDIOTACTIC POLYPROPYLENE. *Macromolecular Symposia*. **89**, 513-527. (10.1002/masy.19950890147)

95 Sozzani, P., Simonutti, R., Comotti, A. 1994 PHASE-STRUCTURE AND POLYMORPHISM OF HIGHLY SYNDIOTACTIC POLYPROPYLENE. *Magnetic Resonance in Chemistry*. **32**, S45-S52.

96 Sozzani, P., Simonutti, R., Galimberti, M. 1993 MAS NMR CHARACTERIZATION OF SYNDIOTACTIC POLYPROPYLENE - CRYSTAL-STRUCTURE AND AMORPHOUS PHASE CONFORMATION. *Macromolecules*. **26**, 5782-5789. (10.1021/ma00073a036)

## Elenco dei Brevetti

1. Simonutti, R., Colombo, A., Beccaria, C., Mombrini, V., inventors; Univ Milano Bicocca; Fond Cassa Di Risparmio Provincia Di Mac; Fond Cassa Di Risparmio Delle Province, assignee. Synthetic resin solution used for forming nanocomposite consolidation and/or protection layer for thin and/or opaque painted surface, comprises nanoparticles dispersion of high refractive index inorganic oxide patent WO2012160525-A1; IT1405870-B.

2. Abbotto, A., Simonutti, R., Manfredi, N., Bianchi, A., inventors; Univ Milano Bicocca, assignee. New block copolymer useful in solid or semi-solid electrolyte, which is useful in photoelectric energy conversion device, photovoltaic cell, and the construction of solid state organic or organometallic dye photovoltaic cells patent WO2012153300-A1.

3. Averchi, A., Di Trapani, P., Pigazzini, M. C., Simonutti, R., inventors; Light in Light Srl, assignee. Optical sky-sun diffuser sets ratio of blue and red scattering optical densities to satisfy predetermined relationship containing monochromatic normalized collinear transmittance patent WO2009156348-A1; EP2304478-A1; US2013070463-A2.

## Comunicazioni su Invito dal 2006

[1] American Chemical Society Spring Meeting, “Solid State NMR at High and Low Field for the characterization of Bioplastics obtained from Vegetable Wastes” 21 Marzo 2018, New Orleans, keynote.

[2] ISPAC, “Solid State at High and Low Field for Polymer Characterization” Giugno 2017, Linz, plenary.

[3] ISPAC, “Understanding the inner Morphology of Polymeric Nanoparticles: expect the unexpected” 9 Giugno 2015, Houston, plenary.

[4] SPIE NanoScience + Engineering, “Polymer based nanocomposites with tailorable optical properties” 20 Agosto 2014, San Diego, plenary.

[5] Max Plank Institute fur Polymerforschung, Mainz, “Playing with light and polymers” February 19 2014, Host Prof. H-J Butt.

[6] Leibniz Institute fur Polymerforschung Dresden, “Self assembly of amphiphilic block copolymers” November 8 2013, Host Dr. Scheler.

[7] Italian-French seminar on Nanotechnologies and Advanced Materials, Grenoble, Nanotechnology and Advanced Materials as enablers of applications in Health, October 21<sup>st</sup>-22<sup>nd</sup>, 2013

[8] ISPAC, Short Course on Polymer Analysis and Characterization “NMR techniques for studying polymer morphology” June 5 2011 Torino.

[9] University of Minnesota at Minneapolis, “Solid State NMR methods for the characterization of nanostructured materials”, October 30 2007, Host Prof. M. Hillmyer.

[10] RWTH Aachen, Institute of Technical Chemistry and Macromolecular Chemistry, “Continuous Flow Hyperpolarized <sup>129</sup>Xe NMR Studies of Nanostructured Materials and Polymers” March 23 2007, Host Prof. B. Bluemich.

[11] New York University, Chemistry Department, “Porous Nanostructured Materials: from van der Waals crystals to mesoporous polymers” December 4 2006, Host Prof. A. Jerschow.

