

CURRICULUM VITAE GIOVANNA LONGHI

Professore associato di Fisica Applicata (a beni culturali, ambientali, biologia e medicina) presso l'Università degli Studi di Brescia, Dipartimento di Medicina Molecolare e Traslazionale.

e-mail: giovanna.longhi@unibs.it

Giovanna Longhi è nata il 28/12/1959 a Milano

-Laurea in Fisica presso l'Università degli studi di Milano il 29/11/1984 (110/110 lode)

-1986, borsa di studio dell'Accademia Nazionale dei Lincei presso Politecnico di Milano gruppo Prof. G. Zerbi; 1987 borsa di studio della scuola di specializzazione "G. Natta" presso Politecnico di Milano.

-1992-1994: ricercatore nel raggruppamento Chimica Fisica presso l'Università della Basilicata.

-Dal 1/11/1995 ricercatore in Fisica Applicata presso l'Università degli Studi di Brescia.

-Dal 1/3/2005 professore associato in Fisica Applicata (Fis07) presso l'Università di Brescia.

-Abilitazione conseguita dal 5-12-2017 in Fisica Applicata (Fis07)

ATTIVITA' DIDATTICA

Presso l'Università degli studi della Basilicata:

-nell' a.a. 91/92 commissioni d'esame corso di Fisica Sperimentale I, corso di laurea in Chimica.

-nell' anno 92/93 lezioni sugli argomenti di spettroscopia ed esperimenti in laboratorio nell'ambito del corso di Esercitazioni di Chimica Fisica II, corso di laurea in Chimica; commissioni d'esame per i corsi di Esercitazioni di Chimica Fisica I e II, Spettroscopia Molecolare e Fisica Sperimentale I

Presso l'Università degli studi di Brescia:

-negli a.a. 95/96 e 96/97 esercitazioni del corso di Fisica, C.d.L. Medicina e del corso di Fisica Medica, C.d.L. Odontoiatria e P.D.

-negli a.a. 98/99, 99/00, 00/01 corso di Fisica Medica, corso di laurea in Odontoiatria e P.D.

-dall'a.a. 01/02 all'a.a. 07/08 coordinatore del corso integrato di Fisica e Statistica e docente del corso di Fisica, corso di laurea in Odontoiatria e P.D.

-dall'a.a. 08/09 ad oggi il corso di Fisica Applicata per il corso di laurea in Odontoiatria e P.D.

-dall'a.a. 02/03 all'a.a. 08/09 corso di Fisica Applicata (Laboratorio) nell'ambito del corso integrato di Laboratorio I, corso di laurea in Biotecnologie.

-dall'a.a. 08/09 ad oggi è stata coordinatore del corso integrato di Matematica e Fisica e ha tenuto il corso di Fisica, corso di laurea in Biotecnologie.

-nell'a.a. 07/08 all'a.a. 11/12 è stata coordinatore del corso integrato di Fisica e Statistica e Informatica e docente del corso di Fisica per il corso di laurea in Dietistica.

-tra i compiti didattici negli anni 98/99, 99/00, 00/01 ha tenuto seminari di Biofisica per il corso integrato di Fisiologia e Biofisica per il Diploma Universitario per Tecnico sanitario di laboratorio biomedico e ha fatto parte della commissione d'esame.

-dal 1996 fa parte di commissioni d'esame per il corso di Fisica Medica del corso di laurea in Medicina e Chirurgia

-nel 1996 e 1998 è stata membro della commissione d'esame ai test di ammissione ai Diplomi Universitari per Tecnico sanitario di laboratorio biomedico, per Fisioterapista e per Infermiere, negli anni 1999-2001 è stata membro della commissione d'esame ai test di ammissione al corso di laurea in Odontoiatria e P.D., nel 2000 anche per l'ammissione al corso di laurea in Medicina, nel 2002 ai corsi di laurea in Biotecnologie e in Scienze Motorie; dal 2002 e' stata membro della commissione d'esame ai test di ammissione ai corsi di laurea per le Professioni Sanitarie

-a.a. 2012-13 partecipazione al collegio docenti del dottorato Neuroscienze dell'Università di Brescia.

-Seminari nell'ambito del Dottorato in Ingegneria dei Materiali Politecnico di Milano:

“Spettroscopia di Dicroismo Circolare: principi e applicazioni” 28-05-2009

“Chiroptical spectroscopies for investigating soft matter and organic-based conducting materials” 20-06-2014

- Valutatore esterno di tesi e presidente di commissione di esame Dottorato in Ingegneria dei Materiali Politecnico di Milano: gennaio 2016, candidato Daria Ruth Galimberti “First principles modelling for the prediction of the structure and the spectroscopic response of molecular materials”

-Valutatore esterno tesi di dottorato in Chimica Università di Malaga Spagna: maggio 2014, candidato Belen Nieto Ortega “Chirality in supramolecular structures: Circular Dichroism (ECD, VCD and ROA)

novembre 2014, candidato José Luis Zafra Paredes “Kekulé biradicals Raman spectroscopy in the singlet transition”

-anno 2017 partecipazione al collegio docenti del dottorato in Genetica Molecolare, Biotecnologie e Medicina Sperimentale dell’Università di Brescia.

-anno 2018 partecipazione al collegio docenti del dottorato in Precision Medicine dell’Università di Brescia

ATTIVITA' ORGANIZZATIVA

-Segreteria del Convegno di studio “Recenti Tecniche Spettroscopiche nella Scienza dei Materiali”, organizzato sotto gli auspici del C.N.R. (Programma Finalizzato Chimica Fine e Secondaria) nei giorni 25-27 Novembre 1985 dal Prof. Zerbi a Milano.

-Organizzatrice dello Workshop “Recent Progresses in the interpretation of chiroptical data for the assignment of the absolute configuration” (Brescia, 24-25/07/2002) (nell’ambito del progetto PRIN 2001)

- Membro eletto, tra i ricercatori, del Consiglio di Facoltà di Medicina e Chirurgia dell’Università di Brescia dal 1999 al 2005

-Membro eletto del Consiglio della Ricerca dell’Università di Brescia (2001-2002)

-Membro di una commissione di valutazione comparativa per posti da ricercatore presso l’Università degli Studi di Parma facoltà di Scienze MM.FF.NN. e di due commissioni di valutazione comparativa per posti da ricercatore presso l’Università degli Studi di Milano, Facoltà di Scienze Motorie. Membro di due commissioni per la conferma di Professori associati.

-Membro della Commissione didattica paritetica del Dipartimento di Medicina Molecolare e Traslazionale dal 2012 ad oggi

RICERCA SCIENTIFICA

Giovanna Longhi è autrice di 130 articoli scientifici in riviste internazionali con referee e di 3 capitoli di libro. orcid.org/0000-0002-0011-5946
The H index is 22 (WoS).

Coordinatrice dell’Unità locale di Brescia in tre progetti di ricerca nazionale PRIN:

-2001 (2001038157) "New theoretical and experimental methods for the assignment of the molecular absolute configuration in solution"

-2004 (2004033322) "New theoretical and experimental methods for the assignment of the molecular absolute configuration in solution"

-2008 (2008LYSEBR) “Determination of the molecular absolute configuration by means of chiroptical spectroscopies: development of new efficient methods and their application to bioactive molecules”

-Progetto per l’utilizzo di risorse computazionali del CINECA nell’ambito del programma LISA (Interdisciplinary Laboratory for Advanced Simulation) finanziato da Regione Lombardia (call II/2013) “Chiroptical properties of conjugated systems (ChirConj)”

(Call 2017) “Structural characterization of phytotoxins by computational modelling and chiroptical spectroscopies” ChiPhyto-HPL13POZE1

Nell'ambito dei programmi Italian SuperComputing Resource Allocation ISCRA-C "Simulation of SelfAssembling bio-inspired materials with optimal mechanical properties" Selfass-HP10CP7Y24

- Coordinatrice dell'Unità locale di Brescia nel progetto CARIPLO2011 "Chiroptical properties of conjugated systems" finanziato da Fondazione Cariplo (Advanced Materials Projects).

-Coautrice del brevetto MI2014A000948-23/05/2014 "Oligoareni e oligoeteroareni macrociclici elettroattivi ad assi stereogenici".

-Member of Consorzio Nazionale Interuniversitario per le Scienze Fisiche della Materia (CNISM)

-Referee di alcune riviste scientifiche internazionali: Chemical Communications, Physical Chemistry Chemical Physics, Chirality, Tetrahedron, Soft Matter, Materials Chemistry and Physics, Vibrational Spectroscopy, The Journal of Physical Chemistry, The Journal of Physical Chemistry Letters, Organic and Biomolecular Chemistry, Analytica Chimica Acta, Computational Materials Science, Chemical Science, Synthetic Metals

COLLABORAZIONI RECENTI

All'estero:

Teodomiro Lopez Navarrete, University of Màlaga, Spain

Juan Manuel Cuerva, University of Grenada, Spain

Prasad L. Polavarapu, Vanderbilt University, Nashville, Tennessee, U.S.A.

Valentin Paul Nicu, University of Amsterdam, The Netherlands

Stefan Boiadjiev, University of Pleven, Pleven, Bulgaria

David A. Lightner, University Nevada, Reno, Nevada, U.S.A.

Magdalena Pecul, University of Warsaw, Poland

Uwe Pischel University of Huelva, Spain

In Italia

Sandro L. Fornili Università di Milano

Vincenzi Turco Liveri Università di Palermo

Matteo Tommasini, Politecnico di Milano

Vincenzo Barone, Scuola Normale Superiore, Pisa

Claudio Villani, Università di Roma "La Sapienza"

Renzo Ruzziconi, Università di Perugia

Riccardo Zanasi, Paola Rizzo, Università di Salerno

Tiziana Benincori, Università dell'Insubria

Patrizia Mussini, Università di Milano

Edoardo Cesarotti, Università di Milano

Claudia Tomasini, Università di Bologna

Fernando Formaggio, Cristiano Zonta, Università di Padova

Antonio Evidente, Università di Napoli "Federico II"

Simona Collina, Università di Pavia

PRINCIPALI INTERESSI DI RICERCA

I principali interessi di ricerca sono: spettroscopie chirottiche in assorbimento (nelle regioni spettroscopiche dall'IR all'UV), e in emissione, sia luminescenza che Raman.

-Sviluppo di strumentazione spettroscopica.

-Calcoli quantistici basati sulla Teoria del Funzionale Densità (DFT) e "Time Dependent-DFT", calcoli di dinamica classica (Dinamica Molecolare), trattazione semiclassica di anarmonicità meccaniche ed elettriche al fine di interpretare dati spettroscopici.

-Applicazione delle analisi spettroscopiche sperimentali e teoriche per lo studio di molecole organiche, complessi, polimeri, anche tenendo in considerazione diversi ambienti (solvente, tensioattivi, fibrille...) e diverse condizioni chimico fisiche (temperatura, pH, stato di carica con l'applicazione di potenziale).

Descrizione dei diversi interessi scientifici e dei risultati ottenuti

a) Attività Ottica Vibrazionale (VOA)

Nel 2005 il gruppo di ricerca ha acquisito il primo strumento in Italia di Dicroismo Circolare Vibrazionale FTIR-VCD. Da allora sono stati pubblicati circa 40 lavori in cui la tecnica VCD ha permesso di studiare prodotti naturali, complessi metallo-organici, peptidi e peptidomimetici, tensioattivi, sistemi elicenici e altri composti utili per la scienza dei materiali. Inoltre alcuni lavori hanno riguardato composti modello al fine di testare algoritmi computazionali appropriati per il miglior utilizzo della tecnica.

Nel 2013 si è occupata di Attività Ottica Raman (ROA), la tecnica complementare al VCD che permette di misurare la differenza in scattering Raman di luce polarizzata circolarmente in senso destrorso e sinistrorso, da parte di molecole chirali. Ha scritto due lavori riguardanti questa spettroscopia: le misure sono state fatte per merito di collaborazioni internazionali, mancando in Italia, tale strumentazione.

Sempre riguardo all'attività ottica vibrazionale (VOA), ha contribuito a sviluppare e verificare modelli interpretative (eccitoni vibrazionali), criteri per l'analisi dei risultati computazionali in confronto con quelli sperimentali (robustezza), modelli basati sulle coordinate interne nel caso in cui siano presenti moti a larga ampiezza o altri modi che presentano alti contributi anarmonici (risonanze di Fermi and Darling-Dennison).

b) Luminescenza Circolarmente Polarizzata (CPL)

Nel 2010 GL ha progettato e realizzato uno strumento per analizzare la polarizzazione circolare della luminescenza (CPL) emessa da molecole chirali, cioè la differenza tra la componente polarizzata circolarmente in senso sinistrorso e quella in senso destrorso. Lo strumento permette di trattare soluzioni oppure film adottando diverse geometrie di eccitazione ed emissione.

Sono stati studiati spettri CPL di varie molecole organiche con particolare attenzione a composti utili per la scienza dei materiali a/o di interesse biologico: molecole sensibili a variazioni di pH, alla presenza di ioni metallici, alla formazione di fibrille.

La caratterizzazione con questo tipo di spettroscopia è importante per composti che possono essere utilizzati per "OLED" diodi organici emettitori: i dati CPL forniscono informazioni sulla struttura in stato eccitato, e possono essere comparati con le previsioni teoriche, conducendo in parallelo calcoli TD-DFT di spettri dopo aver ottimizzato la geometria in stato eccitato. In questa maniera, tra gli altri, sono stati caratterizzati materiali a base elicenica e tiofenica, e coloranti di interesse per applicazioni biologiche.

c) Spettroelettrochimica in Dicroismo Circolare

In collaborazione con la Prof. P. Mussini dell'Università di Milano è stato possibile condurre a Brescia misure di Dicroismo Circolare in voltammetria su composti a base tiofenica sintetizzati presso l'Università dell'Insubria dalla Prof. Benincori. I dati sperimentali così ottenuti a diversi stati di carica e spin sono stati simulati in modo soddisfacente con calcoli TD-DFT.

d) Assorbimento e Dicroismo Circolare nella regione spettroscopica vicino infrarossa (NIR and NIR-VCD) e teoria a modi locali

Fin dalla tesi di laurea, ha introdotto in Italia la spettroscopia vibrazionale a "modi locali", cioè la spettroscopia di assorbimento di transizioni vibrazionali di sovratono, in particolare relativamente a transizioni vibrazionali di modi di stiramento di gruppi XH. E' stata

così studiata l'anarmonicità di tali legami in molecole semplici e la transizione da un regime armonico a modi normali a un regime a modi locali.

Nel 2000 ha realizzato uno spettrofotometro dispersivo per registrare spettri VCD nella regione vicino IR (NIR-VCD) che ha permesso di registrare spettri di un buon numero di molecole specialmente nell'intervallo spettroscopico 1300-1000 nm ($n=3$ nel caso di stiramenti CH) e 1600-1300 nm ($n=2$ nel caso di stiramenti OH). Col supporto di calcoli DFT è arrivata a un'efficace interpretazione degli spettri NIR-VCD in ipotesi di modi locali, condizione garantita dalla forte anarmonicità dei modi di stiramento CH e OH. Un rinnovato interesse in letteratura per questa spettroscopia è sorto anche per la recente implementazione di correzioni anarmoniche in alcuni programmi di calcolo quantomeccanici.

e) Calcoli semiclassici di spettri vibrazionali

Nel 1998, al fine di interpretare spettri NIR-VCD, ha proposto un'equazione per calcolare tali spettri per mezzo della funzione di cross-correlazione del momento elettrico e del momento magnetico di transizione e la relativa trasformata di Fourier. Di recente questo approccio è stato giudicato utile anche da altri gruppi per predire spettri IR-VCD e ROA di molecole chirali in soluzione, combinando metodi quanto meccanici e classici, in particolare MD.

f) Calcoli di Dinamica Molecolare (MD) e risposta CD

Al fine di interpretare spettri CD di peptidi e proteine, ha condotto simulazioni di Dinamica Molecolare e calcoli della risposta CD sulle diverse strutture rappresentative della simulazione ottenuta, adottando il metodo eccitonico esteso presente in letteratura (Woody).

Simulazioni MD sono state condotte anche per studiare l'aggregazione di tensioattivi in fase gassosa, come si osserva in esperimenti di ionizzazione electrospray, a questo scopo di recente ha adottato anche un protocollo basato sulla metadinamica.

g) Studi conformazionali tramite spettroscopie IR e Raman: normal-alcanti, polietilene, carboidrati

Ha utilizzato la spettroscopia IR e Raman per trovare segnali spettroscopici indicativi del disordine conformazionale delle catene alifatiche, dove interazioni di tipo anarmonico (risonanza di Fermi) sono importanti. L'interesse per questi segnali spettroscopici ha ricevuto un rinnovato interesse in relazione alle tecniche di "imaging" basate sulle spettroscopie Raman, applicate a vasi sanguigni e al derma.

Un altro uso della spettroscopia vibrazionale IR e Raman ha riguardato studi conformazionali di alfa e beta glucosio: in questo modo ha notato che le costanti di forza di stiramenti CH le cariche parziali sono determinate dalla orientazione dei legami CH rispetto agli orbitali di "lone pair" degli atomi vicini di ossigeno dei gruppi idrossilici e del ponte glicosidico in polisaccaridi. Questi studi sono ancora di interesse attuale per esempio quando si usa la tecnica VCD per studiare glicoproteine.

Brescia, 20-08-2018

Giovanna Longhi