

SERGIO ABBATE

Italiano, Sartirana Lomellina (PV), 23 Settembre, 1950
Sposato, due figli

PROFESSORE ORDINARIO DI FISICA APPLICATA (SSD FIS/07), Università di Brescia
Dipartimento di Medicina Molecolare e Traslazionale.

DELEGATO DEL RETTORE DELLA UNIVERSITA' DI BRESCIA NEL CONSORZIO NAZIONALE
INTERUNIVERSITARIO DI SCIENZE FISICHE DELLA MATERIA (C.N.I.S.M.)
Dal 2010 ad ora.

POSIZIONI ACCADEMICHE E DI RICERCA

- 2001-ora Professore Ordinario di Fisica Applicata, *Università di Brescia*, Facoltà di Medicina. Attivo nel campo delle Spettroscopie Chiroottiche. Ha organizzato e dirige un Laboratorio con la maggior parte delle Tecniche Chiroottiche Sperimentali e Computazionali.
- 1993-2001 Professore Associato di Fisica Applicata, *Università di Brescia*. Campo di ricerca principale: Spettroscopie Chiroottiche.
- 1991-1993 Professore Associato di Chimica Fisica *Università della Basilicata, Potenza*. Campo di ricerca principale: Spettroscopie Chiroottiche e Dinamica Semiclassica.
- 1987-1991 Professore Associato di Chimica Fisica *Università di Palermo*. Campo di ricerca principale: Spettroscopia Vibrazionale e Dinamica Semiclassica.
- 1976-1987 Ricercatore CNR (*Consiglio Nazionale delle Ricerche, Roma*), presso l'Istituto di Chimica delle Macromolecole e l'Istituto di Chimica Industriale del Politecnico di Milano. Campi di Ricerca: Spettroscopie infrarossa, vicino-infrarossa e Raman di composti organici e polimeri.
- 1979-1981 "Post-doctoral fellow" (borsa Fullbright): Università del Minnesota; collabora con Albert Moscowitz e John Overend

STUDI E FORMAZIONE

- 1974 Laurea in Fisica, Università di Milano. Argomento di tesi: Effetto Raman di Polimeri e di semplici composti organici, con particolare attenzione al problema delle intensità. (Relatore: prof. G. Zerbi)

RICERCA

"Expertise"

Esperto di Spettroscopie vibrazionali, infrarosse e Raman. Esperto di Spettroscopie chiroottiche, soprattutto di Dicroismo Circolare (CD) dall'infrarosso all'UV-visibile. Metodi teorici per trattare la dinamica classica, semiclassica e quantistica di composti organici.

Risultati principali

- 1975-1985 Ha trattato il problema delle intensità degli spettri infrarossi (IR) e Raman. Ha contribuito ad implementare il primo spettrofotometro FTIR in Italia, al Politecnico di Milano. Si occupa di aspetti della non-linearità delle forze di legame (o anarmonicità), che determinano l'attivazione di moti di solito assenti negli spettri IR e Raman (*Risonanza di Fermi*) o la localizzazione di moti vibrazionali (*modi locali* da modi normali) tramite la risonanza di Darling-Dennison.
- 1980-1982 Propone una nuova interpretazione degli spettri di dicroismo circolare nell'infrarosso (IRCD o VCD), mediante il modello dei flussi di carica lungo i legami chimici, collaborando con Moscowitz ed Overend all'Università del Minnesota.

1985-2000 Si occupa di spettroscopia vicino-infrarossa (NIR) e di effetti anarmonici in spettroscopia vibrazionale. Si interessa del modello a modi locali e del suo impatto nelle spettroscopie NIR. Prima osservazione di spettri VCD nel NIR.
1995-2005 Si interessa di metodi di Dinamica Molecolare (MD) per interpretare dati (prevalentemente spettroscopici) di polimeri otticamente attivi, proteine e peptidi in soluzione.
2000-2005 Progetta e realizza con Ettore Castiglioni e Giovanna Longhi uno spettrometro NIR-CD, che viene utilizzato per problemi vibrazionale anarmonici (NIR-VCD).
2005 Implementa il primo spettrometro VCD nel medio infrarosso in Italia.
2010 Progetta e realizza con Ettore Castiglioni e Giovanna Longhi uno spettrometro CPL, "Circularly Polarized Luminescence".

Gruppo di Ricerca e Laboratorio di Spettroscopie Chiroottiche

Ha istruito due ricercatori, diventati professore associato (Giovanna Longhi) e primo ricercatore rispettivamente (Stefania Pizzini, presso CNRS, Grenoble, in Francia). Ha istruito e poi collaborato con due ricercatori confermati, che hanno fatto parte del Laboratorio di Fisica presso l'Università di Brescia. Ha collaborato con diversi assegnisti. E' stato relatore di tesi di circa 20 studenti.

A Brescia ha realizzato ed organizzato un laboratorio di spettroscopie chiroottiche, con i seguenti strumenti: Jasco FVS6000, per la misura di spettri VCD; Jasco J815SE, per la misura di spettri ECD (da 185 a 1100 nm); Jasco FP8200, per la misura della fluorescenza; Jasco P2000, polarimetro; apparecchio progettato in casa per la misura di NIR-VCD; apparecchio fatto in casa per la misura di CPL. Ha collaborato all'implementazione di strumenti computazionali ancillari all'interpretazione dei dati chiroottici.

Finanziamenti

Ha operato come responsabile locale di due unità PRIN ed ha collaborato strettamente con Giovanna Longhi, Professore Associato di Fisica Applicata a Brescia, responsabile di tre programmi PRIN e di un programma della Fondazione Cariplo. Ha ottenuto finanziamenti dal Ministero degli Esteri per programmi di collaborazione internazionale con Francia, Belgio ed Egitto.

Società Scientifiche:

Membro dell'American Chemical Society (ACS), dell'associazione Fulbright, della Società Italiana di Fisica; Responsabile locale del CNISM (Consorzio Interuniversitario delle Scienze Fisiche della Materia).

Conferenze e Relazioni su invito a Congressi

Università del Minnesota (1979); FACSS Conference, St. Louis Missouri (1985); CD2005 Conference (2005); ACS Regional Meeting, Nashville, TN, USA (2008); VOA2 Conference, Albany, NY, USA (2010); ICAVS Conference, Sonoma County, CA, USA (2011); VOA3-CECAM Conference, Pisa, Scuola Normale Superiore (2012); CD2013 Conference, Vanderbilt University, Nashville, TN, USA (2013); VOA-4 Conference, Hebei, Cina (2014); CD2015 Conference, Sapporo, Giappone (2015); CD2017 Conference, Rennes, Francia (2017).

Organizzazione Convegni

Ha organizzato il Convegno internazionale CD2009 (12° della serie) in concomitanza al Convegno ISBC (5° della Serie) a Brescia nell'Agosto-Settembre 2009; ha organizzato il Convegno internazionale VOA-6 a Brescia nel Settembre 2018 (6° di una serie ancora attiva).

Pubblicazioni

167 Pubblicazioni circa su riviste internazionali "peer-reviewed" o su volumi di "proceedings" (3). H index 27 (ISI-Web of Science); circa 2500 citazioni

Collaborazioni Scientifiche in corso

In Italia:

Vincenzo Barone – Scuola Normale Superiore, Pisa – MCD, VCD ed anarmonicità

Renzo Ruzziconi – Università di Perugia – sintesi di composti chirali fluorurati per la medicina

Fernando Formaggio – Università di Padova – sintesi e studio di peptide funzionalizzati

Francesco Sannicolò – Università di Milano – sintesi di polimeri conduttori chirali ed elettroattivi

Antonio Evidente – Università di Napoli – studio di prodotti naturali

Simona Collina – Università di Pavia – sintesi ed isolamento di farmaci in forma enantiomericamente pura

Claudio Villani – Università di Roma “La Sapienza” – isolamento e caratterizzazione di composti enantiomericamente puri, in particolare materiali “graphene-like”

Matteo Tommasini – Politecnico di Milano – Spettroscopia Raman e ROA

Paolo Biagioni – Politecnico di Milano – Superchiralità nell’Infrarosso.

All’Estero

David A. Lightner - University of Nevada, Reno, NV, USA – Bilirubins, and Camphors

Stefan E. Boiadjev - University of Pleven, Bulgaria – Bilirubins, and Camphors

Juan Manuel Cuerva – Universidad de Grenada, Spagna – Fluorescent chiral compounds

Guido Clever - University of Dortmund, DE – chiral metal complexes

Andrei Yudin - University of Toronto, Ontario, Canada – chiral boron containing molecules

Prasad L. Polavarapu- Vanderbilt University, Nashville, TN, USA – fundamental VCD properties and study of surfactants and aggregates

DOCENZA

Docente ufficiale o supplente di corsi di Esercitazioni di Chimica Fisica, di Spettroscopia e di Fisica Generale presso le Università di Palermo e della Basilicata, Potenza, dal 1987 al 1993. Docente ufficiale di corsi di Fisica Applicata dal 1991 ad ora per i corsi di laurea in Odontoiatria, Medicina e Chirurgia, Biotecnologie (corsi con un numero di studenti pari a 20, 200 e 60 circa, rispettivamente) dell’Università di Brescia. Dal 2010 docente del corso di Nanotecnologie ed Ingegneria proteica presso il corso di laurea magistrale di Biotecnologie Mediche dell’Università di Brescia.

ELENCO PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE ULTIMI 10 ANNI

1. S. Abbate, L.F. Burgi, E. Castiglioni, F. Lebon, G. Longhi, E. Toscano, S. Caccamese

“Assessment of configurational and conformational properties of Naringenin by Vibrational Circular Dichroism”

Chirality 2009, 21, 436-441

2. S. Abbate, G. Longhi, E. Castiglioni, F. Lebon, P.M. Wood, Lawrence W. L. Woo, Barry V. L. Potter

“Determination of the Absolute Configuration of Aromatase and Dual Aromatase-Sulfatase Inhibitors by Vibrational and Electronic Circular Dichroism Spectra Analysis”

Chirality 2009, 21, 802-809

3. F. Gangemi, R. Gangemi, G. Longhi, S. Abbate

“Experimental and ab-initio calculated VCD spectra of the first OH-stretching overtone of (1R)-(-) and (1S)-(+)-endo-borneol”

Physical Chemistry Chemical Physics 2009, 11, 2683-2689

4. S. Abbate, F. Castiglione, F. Lebon, G. Longhi, A. Longo, A. Mele, W. Panzeri, A. Ruggirello, V. Turco Liveri

“Spectroscopic and Structural Investigation of the Confinement of D and L Dimethyl Tartrate in Lecithin Reverse Micelles”

The Journal of Physical Chemistry B, 2009, 113, 3024-3033

5. F. Gangemi, R. Gangemi, G. Longhi, S. Abbate

“Calculations of overtone NIR and NIR-VCD spectra in the local mode approximation: camphor and camphorquinone”

Vibrational Spectroscopy 2009, 50, 257-267

6. S. Abbate, E. Castiglioni, F. Gangemi, R. Gangemi, G. Longhi

“NIR-VCD, vibrational circular dichroism in the near-infrared: Experiments, theory and calculations”

Chirality, 21, S242-S252 (2009)

7. S. Abbate, F. Lebon, R. Gangemi, G. Longhi, S. Spizzichino, R. Ruzziconi

“Electronic and Vibrational Circular Dichroism Spectra of Chiral 4-X-[2.2]paracyclophanes with X Containing Fluorine Atoms”

The Journal of Physical Chemistry A 2009, 113, 14851-14859

8. S. Abbate, L. F. Burgi, F. Gangemi, R. Gangemi, F. Lebon, G. Longhi, V. Pultz, D. A. Lightner

“Comparative Analysis of IR and Vibrational Circular Dichroism Spectra for a series of Camphor related molecules”

The Journal of Physical Chemistry A 2009, 113, 11390-11405

9. S. Abbate, F. Lebon, G. Longhi, F. Fontana, T. Caronna and D.A. Lightner

“Experimental and calculated vibrational and electronic circular dichroism spectra of 2-Br-hexahelicene”

Physical Chemistry Chemical Physics 2009, 11, 9039-9043

10. E. Castiglioni, P. Biscarini, S. Abbate

“Experimental Aspects of Solid State Circular Dichroism”

Review Article, Chirality, 2009, 21, S28-S36

11. G. Longhi, S. Abbate, P. Scafato, C. Rosini

“A Vibrational Circular Dichroism Approach To The Determination Of The Absolute Configuration Of Flexible And Transparent Molecules: Fluorenone Ketals Of 1,N-Diols”

Physical Chemistry Chemical Physics 2010, 12, 4703-4712

12. G. Longhi, S.L. Fornili, V. Turco Liveri, S. Abbate, D. Rebecani, L. Ceraulo, F. Gangemi
“Sodium bis-(2-ethylhexyl) sulfosuccinate sepf-aggregation in vacuo: Molecular Dynamics simulation”

Physical Chemistry Chemical Physics 2010, 12, 4694-4703

13. S. Abbate, G. Longhi

“The Use of Vibrational Circular Dichroism (VCD) for the Determination of the Absolute Configuration and Conformations of Chiral Molecules: Solved Problems and Problems to be Solved”

Seminars in Organic Chemistry, Società Chimica Italiana, Rome, Italy ISBN 978-88-86208-64-2, pages 89-103 (2010)

14. S. Abbate, L. Di Bari, N. Berova

“Editors’ Note: 12th International Conference on Circular Dichroism and 5th Interdisciplinary Symposium on Biological Chirality”

Chirality, Special Issue, 2010, 22, E1–E2

15. E. Castiglioni, P. Albertini, S. Abbate

“Evaluation of Instrumental Errors Built in Circular Dichroism Spectrometers”

Chirality Special Issue, 2010, 22, E142–E148

16. S. Abbate, A. Ciogli, S. Fioravanti, F. Gasparrini, G. Longhi, L. Pellacani, E. Rizzato, D. Spinelli, P.A. Tardella

“Solving the Puzzling Absolute Configuration Determination of a Flexible Molecule by Vibrational and Electronic Circular Dichroism Spectroscopies and DFT Calculations: The Case Study of a Chiral 2,2-Dinitro-2,2-biaziridine”

European Journal of Organic Chemistry 2010, 6193-6199

17. E. Castiglioni, S. Abbate, G. Longhi

“Revisiting with Updated hardware an old spectroscopic technique: Circularly Polarized Luminescence”

Applied Spectroscopy 2010, 64, 1416-1419 (2010)

18. E. Castiglioni, S. Abbate, G. Longhi

“Experimental Methods for Measuring Optical Rotatory Dispersion: Survey and Outlook”

Chirality 2011, 23, 711-716

19. S. Abbate, F. Lebon, G. Longhi, M. Passarello, V.T. Liveri

“Triggering dissymmetry in achiral dye molecules by chiral solvents: Circular dichroism experiments and DFT calculations.”

Chirality 2011, 23, 910-915

20. S. Abbate, G. Longhi, F. Gangemi, R. Gangemi, S. Superchi, A.M. Caporusso, R. Ruzziconi

“Electrical and mechanical anharmonicities from NIR-VCD spectra of compounds exhibiting axial and planar chirality: The cases of (S)-2,3-pentadiene and methyl-d(3) (R)- and (S)-[2.2]paracyclophane-4-carboxylate”

Chirality 2011, 23, 841-849

21. S. Abbate, F. Lebon, S. Lepri, G. Longhi, R. Gangemi, S. Spizzichino, G. Bellachioma, R. Ruzziconi

“Vibrational Circular Dichroism (VCD): a Valuable Tool for Conformational Analysis and Absolute Configuration Assignment of Chiral 1-([2.2.]Paracyclophan-4-yl)-2,2,2-trifluoroethanols”

ChemPhysChem 2011, 12, 3519-3523

22. G. Longhi, S. Abbate, L. Ceraulo, A. Ceselli, S.L. Fornili, V. Turco Liveri

“A Molecular Dynamics study of structure, stability and fragmentation patterns of Sodium bis(2-ethylhexyl)sulfosuccinate positively charged aggregates in vacuo”

Physical Chemistry Chemical Physics 2011, 13, 21423-21431

23. S. Abbate, G. Longhi, E. Castiglioni

“Near-Infrared Vibrational Circular Dichroism: Nir-Vcd”

Comprehensive Chiroptical Spectroscopy, Volume 1: Instrumentation, Methodologies, and Theoretical Simulations, First Edition. Edited by N. Berova, P.L. Polavarapu, K. Nakanishi, and R. W. Woody, Vol 1, Cap 10, pag 247 (2012), John Wiley & Sons, Inc.

24. E. Castiglioni, S. Abbate, F. Lebon, G. Longhi

“UV, CD, Fluorescence and CPL spectra of regioregular poly-[3-((S)-2-methylbutyl)-thiophene] in solution”

Chirality 2012, 24, 725-730

25. S. Abbate, R. Gangemi, F. Lebon, G. Longhi, M. Passarello, A. Ruggirello, V. Turco Liveri

“Investigations of methyl lactate in the presence of reverse micelles by vibrational spectroscopy and circular dichroism”

Vibrational Spectroscopy 2012, 60, 54-62

26. S. Abbate, F. Lebon, G. Longhi, S.E. Boiadjev, D.A. Lightner

“Vibrational and Electronic Circular Dichroism of Dimethyl Mesobilirubins-XIII α ”

The Journal of Physical Chemistry B 2012, 116, 5628-5636

27. S. Abbate, G. Longhi, F. Lebon, M. Tommasini

“Electronic and vibrational circular dichroism spectra of (R)-(-)-apomorphine”

Chemical Physics, 2012, 405, 197-206

28. G. Longhi, S. Abbate, F. Lebon, N. Castellucci, P. Sabatino. C. Tomasini

“Conformational Studies of Phe-Rich Foldamers by VCD Spectroscopy and ab-Initio Calculations”

Journal of Organic Chemistry 2012, 77, 6033-6042

29. S. Abbate, F. Lebon, G. Longhi, C.F. Morelli, D. Ubiali, G. Speranza
"Vibrational and electronic circular dichroism spectroscopies and DFT calculations for the assignment of the absolute configuration of hydroxyl-substituted 2-tetralols"
RSC Advances 2012, 2, 10200-10208
30. C. Johannessen, E.W. Blanch, C. Villani, S. Abbate, G. Longhi, N.R. Agarwal, M. Tommasini, D.A. Lightner
"Raman and ROA Spectra of (-)- and (+)-2-Br-Hexahelicene: Experimental and DFT Studies of a π -Conjugated Chiral System"
The Journal of Physical Chemistry B 2013, 117, 2221-2230
31. G. Longhi, E. Castiglioni, S. Abbate, F. Lebon, D.A. Lightner
"Experimental and Calculated CPL spectra and related spectroscopic data of camphor and other simple chiral bicyclic ketones"
Chirality 2013, 25, 589-599
32. G. Longhi, A. Ceselli, S.L. Fornili, S. Abbate, L. Ceraulo, V. Turco Liveri
"Molecular Dynamics of electrosprayed water nanodroplets containing sodium bis(2-ethylhexyl)sulfosuccinate"
Journal of Mass Spectrometry 2013, 48, 478-486
34. P. Scafato, F. Caprioli, L. Pisani, D. Padula, F. Santoro, G. Mazzeo, S. Abbate, F. Lebon, G. Longhi
"Combined use of three forms of chiroptical spectroscopies in the study of the absolute configuration and conformational properties of 3-phenylcyclopentanone, 3-phenylcyclohexanone, and 3-phenylcycloheptanone"
Tetrahedron, 2013, 69, 10752-10762
35. N. Castellucci, G. Falini, L. Milli, M. Monari, S. Abbate, G. Longhi, E. Castiglioni, G. Mazzeo, C. Tomasini
"Solid State Properties and VCD Spectroscopy in Solution of Hybrid Foldamers Stereoisomeric Mixtures"
ChemPlusChem 2014, 79, 114-121
36. M. Tommasini, G. Longhi, S. Abbate, G. Zerbi
"Theoretical investigation and computational evaluation of overtone and combination features in resonance Raman spectra of polyenes and carotenoids"
Journal of Raman Spectroscopy 2014, 45, 89-96
37. S. Abbate, G. Longhi, F. Lebon, E. Castiglioni, S. Superchi, L. Pisani, F. Fontana, F. Torricelli, T. Caronna, C. Villani, R. Sabia, M. Tommasini, A. Lucotti, D. Mendola, A. Mele, D.A. Lightner
"Helical Sense-Responsive and Substituent-Sensitive Features in Vibrational and electronic Circular Dichroism, in Circularly Polarized Luminescence and in Raman Spectra of Some Simple Optically Active Hexahelices"
The Journal of Physical Chemistry C 2014, 118, 1682-1695

38. S. Abbate, M. Passarello, F. Lebon, G. Longhi, A. Ruggirello, V. Turco Liveri, F. Viani, F. Castiglione, D. Mendola, A. Mele

Chiroptical Phenomena in Reverse Micelles: The Case of (1R,2S)-Dodecyl (2-hydroxy-1-methyl-2-phenylethyl)dimethylammonium Bromide (DMEB)

Chirality 2014, 26,172–178

39. E. Castiglioni, S. Abbate, F. Lebon, G. Longhi

"Chiroptical spectroscopic techniques based on fluorescence"

Methods and Applications in Fluorescence, 2014, 2, 024006 (7 pages)

40. G. Longhi, Sergio Abbate, Alberto Ceselli, Leopoldo Ceraulo, Sandro L. Fornili, V. Turco Liveri

"Structure, stability and fragmentation of Sodium bis(2-ethylhexyl)sulfosuccinate negatively charged aggregates in vacuo by MD simulations"

Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 2014, 25, 1642-1649

41. M. Passarello, S. Abbate, G. Longhi, S. Lepri, R. Ruzziconi, V.P. Nicu

"Importance of C*–H Based Modes and Large Amplitude Motion: Effects in Vibrational Circular Dichroism Spectra: The Case of the Chiral Adduct of Dimethyl Fumarate and Anthracene"

The Journal of Physical Chemistry A, 2014, 118, 4339-4350

42. G. Longhi, S. Abbate, G. Mazzeo, E. Castiglioni, P. Mussini, T. Benincori, R. Martinazzo, F. Sannicolò

"Structural and Optical Properties of Inherently Chiral Polythiophenes: A Combined CD-Electrochemistry, Circularly Polarized Luminescence and TDDFT Investigation"

The Journal of Physical Chemistry C, 2014, 118, 16019-16027

43. F. Sannicolò, P.R. Mussini, T. Benincori, R. Cirilli, S. Abbate, S. Arnaboldi, S. Casolo, E. Castiglioni, G. Longhi, R. Martinazzo, M. Panigati, M. Pappini, E. Quartapelle Procopio, S. Rizzo

"Inherently Chiral Macrocyclic Oligothiophenes: Easily Accessible Electrosensitive Cavities with Outstanding Enantioselection Performances"

Chemistry a European Journal, 2014, 20, 15298-15302

44. G. Mazzeo, G. Longhi, S. Abbate, F. Buonerba, R. Ruzziconi

"Chiroptical Signatures of Planar and Central Chirality in [2]Paracyclo[2](5,8)quinolinophane Derivatives"

European Journal of Organic Chemistry, 2014, 7353-7363

45. E. Monti, G. Benaglia, A. Mozzi, P. Fusi, G. Longhi, F. Gangemi, E. Castiglioni, R. W. Woody, S. L. Fornili, S. Abbate,

"Looking at Human Cytosolic Sialidase NEU2 Structural Features with an Interdisciplinary Approach"

Biochemistry, 2014, 53, 5343–5355

46. M. Tommasini, G. Longhi, G. Mazzeo, S. Abbate, B. Nieto-Ortega, F.J. Ramirez, J. Casado, J.T. Lopez Navarrete

“Mode robustness in Raman Optical Activity”

Journal of Chemical Theory and Computation, 2014, 10, 5520-5527

47. S. Abbate, G. Mazzeo, S. Meneghini, G. Longhi, S.E. Boiadjev, D. A. Lightner

“Bicamphor: a prototypic molecular system to investigate vibrational excitons”

The Journal of Physical Chemistry A, 2015, 119, 4261-4267

48. M. Fusè, G. Mazzeo, G. Longhi, S. Abbate, D. Zerla, I. Rimoldi, A. Contini, E. Cesarotti

“VCD spectroscopy as an excellent probe of chiral metal complexes containing a carbon monoxide vibrational chromophore”

Chemical Communications, 2015, 51, 9385-9387

49. Belen Nieto-Ortega, F. García, Giovanna Longhi, Ettore Castiglioni, J. Calbo, S. Abbate, J. T. López Navarrete, F. J. Ramírez, E. Ortí, L. Sánchez, J. Casado

“On the handedness of helical aggregates of C3 tricarboxamides: a multichiroptical characterization”

Chemical Communications, 2015, 51, 9781-9784

50. B. Nieto-Ortega, J. Casado, J. T. López Navarrete, F. J. Ramirez, M. Tommasini, G. Longhi, G. Mazzeo, S. Abbate

“Understanding the Origin of the VCD Signals on the Basis of a Non-Redundant Coordinate Definition”

Journal of Chemical Theory and Computation, 2015, 11, 2633–2641

51. Francesco Zinna, Claudio Resta, Sergio Abbate, Ettore Castiglioni, Giovanna Longhi, Placido Mineo, Lorenzo Di Bari

“Circularly polarized luminescence under near-UV excitation and structural elucidation of a Eu complex”

Chemical Communications, 2015, 51, 11903-11906

52. Giuseppe Mazzeo, Sergio Abbate, Giovanna Longhi, Ettore Castiglioni, Claudio Villani

“Vibrational Circular Dichroism (VCD) Reveals Subtle Conformational Aspects and Intermolecular Interactions in the Carnitine Family”

Chirality, 2015, 27, 907-913

53. Giovanna Longhi, Matteo Tommasini, Sergio Abbate, Prasad L. Polavarapu

“The Connection Between Robustness Angles and Dissymmetry Factors in Vibrational Circular Dichroism Spectra”

Chemical Physics Letters, 2015, 623, 320-325

54. Giuseppe Mazzeo, Marco Fusè, Giovanna Longhi, Isabella Rimoldi, Edoardo Cesarotti, Alessandra Crispini, Sergio Abbate

“Vibrational circular dichroism and chiroptical properties of chiral Ir(III) luminescent complexes”

Dalton Transactions, 2016, 45, 992–999

55. S. Meninno, P. Rizzo, S. Abbate, G. Longhi, G. Mazzeo, G. Monaco., A. Lattanzi, R. Zanasi
“Absolute Configuration Assignment of a Paraconic Acid Derivative via Vibrational Circular
Dichroism Spectroscopy and Density Functional Theory Calculation”

Chirality, 2016, 28, 110–115

56. Giuseppe Mazzeo, Sergio Abbate, Giovanna Longhi, Ettore Castiglioni, Stefan E. Boiadjev,
David A. Lightner

“pH Dependent Chiroptical Properties of (1R,2R)- and (1S,2S)-trans-Cyclohexane Diesters and
Diamides from VCD, ECD, and CPL Spectroscopy.”

The Journal of Physical Chemistry B, 2016, 120, 2380-2387

57. Giovanna Longhi, Matteo Tommasini, Sergio Abbate, Prasad L. Polavarapu

“Corrigendum to “The connection between robustness angles and dissymmetry factors in vibrational
circular dichroism spectra” [Chem. Phys. Lett. 639 (2015) 320–325]”

Chemical Physics Letters, 2016, 648, 208

58. Daniela Rossi, Rita Nasti, Annamaria Marra, Silvia Meneghini, Giuseppe Mazzeo, Giovanna
Longhi, Maurizio Memo, Barbara Cosimelli, Giovanni Greco, Ettore Novellino, Federico Da Settimo,
Claudia Martini, Sabrina Taliani, Sergio Abbate, Simona Collina

“Enantiomeric 4-Acylamino-6-alkyloxy-2 Alkylthiopyrimidines As Potential A3 Adenosine Receptor
Antagonists: HPLC Chiral Resolution and Absolute Configuration Assignment by a Full Set of
Chiroptical Spectroscopy”

Chirality, 2016, 28, 434–440

59. Yanli Liu, Javier Cerezo, Giuseppe Mazzeo, Na Lin, Xian Zhao, Giovanna Longhi, Sergio
Abbate, Fabrizio Santoro

“Vibronic Coupling Explains the Different Shape of Electronic Circular Dichroism and of Circularly
Polarized Luminescence Spectra of Hexahelicenes”

Journal of Chemical Theory and Computation, 2016, 12, 2799-2819

60. Sara P. Morcillo, Delia Miguel, Luis Álvarez de Cienfuegos, José Justicia, Sergio Abbate, Ettore
Castiglioni, Christophe Bour, María Ribagorda, Diego J. Cárdenas, José Manuel Paredes, Luis
Crovetto, Duane Choquesillo-Lazarte, Antonio J. Mota, M. Carmen Carreño, Giovanna Longhi, Juan
M. Cuerva

“Stapled helical o-OPE foldamers as new Circularly Polarized Luminescence emitters based on
carbophilic interactions with Ag(I)-sensitivity”

Chemical Science, 2016, 7, 5663-5670

61. Anna Rybicka, Giovanna Longhi, Ettore Castiglioni, Sergio Abbate, Wojciech Dzwolak, Viktoria
Babenko, Magdalena Pecul

“Thioflavin T: Electronic Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence Induced by
Amyloid Fibrils”

ChemPhysChem, 2016, 17, 2931-2937

62. Cinzia Citti, Umberto M. Battisti, Giuseppe Ciccarella, Vincenzo Maiorano, Giuseppe Gigli, Sergio Abbate, Giuseppe Mazzeo, Ettore Castiglioni, Giovanna Longhi, Giuseppe Cannazza

“Analytical and preparative enantioseparation and main chiroptical properties of Iridium(III) bis(4,6-difluorophenylpyridinato)picolinate”

Journal of Chromatography A, 2016, 1467, 335-346

63. Giovanna Longhi, Ettore Castiglioni, Claudio Villani, Rocchina Sabia, Stefano Menichetti, Caterina Viglianisi, Frank Devlin, Sergio Abbate

“Chiroptical properties of the ground and excited states of two thia-bridged triarylamine heterohelicenes”

Journal of Photobiology and Photochemistry A: Chemistry, 2016, 331, 138-145

64. Giovanna Longhi, Ettore Castiglioni, Jun Koshoubu, Giuseppe Mazzeo, Sergio Abbate

“Circularly Polarized Luminescence: A Review of Experimental and Theoretical Aspects”

Chirality, 2016, 28, 696-707

65. Sara Gabrieli, Giuseppe Mazzeo, Giovanna Longhi, Sergio Abbate, Tiziana Benincori

“Discrimination of Axial and Central Stereogenic Elements in Chiral Bis (oxazolines) Based on Atropisomeric 3,3'-Bithiophene Scaffolds Through Chiroptical Spectroscopies”

Chirality, 2016, 28, 686-695

66. Javier Cerezo, Giuseppe Mazzeo, Giovanna Longhi, Sergio Abbate, Fabrizio Santoro

“Quantum-Classical Calculation of Vibronic Spectra along a Reaction Path: The Case of the ECD of Easily Interconvertible Conformers with Opposite Chiral Responses”

The Journal of Physical Chemistry Letters 2016, 7, 4891–4897

67. Sergio Abbate, Torsten Bruhn, Gennaro Pescitelli, Giovanna Longhi

“Vibrational Optical Activity of BODIPY Dimers: The Role of Magnetic–Electric Coupling in Vibrational Excitons”

The Journal of Physical Chemistry A, 2017, 121, 394–400

68. Daniela Rossi, Rita Nasti, Simona Collina, Giuseppe Mazzeo, Simone Ghidinelli, Giovanna Longhi, Maurizio Memo, Sergio Abbate.

“The role of chirality in a set of key intermediates of pharmaceutical interest, 3-aryl-substituted- γ -butyrolactones, evidenced by chiral HPLC separation and by chiroptical spectroscopies”

Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 2017, 144, 41-51

69. Andreea Ionescu, Nicolas Godbert, Loredana Ricciardi, Massimo La Deda, Iolinda Aiello, Mauro Ghedini, Isabella Rimoldi, Edoardo Cesarotti, Giorgio Facchetti, Giuseppe Mazzeo, Giovanna Longhi, Sergio Abbate, Marco Fusè

“Luminescent water-soluble cycloplatinated complexes: Structural, photophysical, electrochemical and chiroptical properties”

Inorganica Chimica Acta 2017, 461, 267–274

70. Giuseppe Mazzeo, Giovanna Longhi, Sergio Abbate, Martina Palomba, Luana Bagnoli, Francesca

Marini, Claudio Santi, Jianlin Han, Vadim A. Soloshonok, Emilio Di Crescenzo, Renzo Ruzziconi
“Solvent-free, uncatalyzed asymmetric “ene” reactions of N-tert-butylsulfinyl-3,3,3-trifluoroacetaldimines: a general approach to enantiomerically pure α -(trifluoromethyl)tryptamines”
Organic & Biomolecular Chemistry 2017, 15, 3930-3937

71. Daniela Rossi, Karzan Mahmood Ahmed, Raffaella Gaggeri, Serena Della Volpe, Lauretta Maggi, Giuseppe Mazzeo, Giovanna Longhi, Sergio Abbate, Federica Corana, Emanuela Martino, Marisa Machado, Raquel Varandas, Maria do Céu Sousa, Simona Collina
“(R)-(-)-Aloesaponol III 8-Methyl Ether from *Eremurus persicus*: A Novel Compound against Leishmaniasis”
Molecules 2017, 22, 519

72. Thorben R. Schulte, Julian J. Holstein, Lennard Krause, Reent Michel, Dietmar Stalke, Eri Sakuda, Keisuke Umakoshi, Giovanna Longhi, Sergio Abbate, Guido H. Clever
“Chiral-at-Metal Phosphorescent Square-Planar Pt(II)-Complexes from an Achiral Organometallic Ligand”
Journal of the American Chemical Society, 2017, 139, 6863-6866

73. Giuseppe Mazzeo, Giovanna Longhi, Victoria B. Corless, Adam Zajdlik, Andrei K. Yudin, Sergio Abbate
“Vibrational Circular Dichroism Unveils Chiroptical, Electrical and Magnetic Properties of Borylated Isocyanides and Aldehydes”
European Journal of Organic Chemistry, 2017, 5262-5268

74. Wenlong Yang, Giovanna Longhi, Sergio Abbate, Andrea Lucotti, Matteo Tommasini, Claudio Villani, Vincent J. Catalano, Aleksandr O. Lykhin, Sergey A. Varganov, Wesley A. Chalifoux
“Chiral Peropyrene: Synthesis, Structure, and Properties”
Journal of the American Chemical Society, 2017, 139, 13102–13109

75. Giuseppe Mazzeo, Alessio Cimmino, Marco Masi, Giovanna Longhi, Lucia Maddau, Maurizio Memo, Antonio Evidente, Sergio Abbate
“Importance and Difficulties in the Use of Chiroptical Methods to Assign the Absolute Configuration of Natural Products: the Case of Phytotoxic Pyrones and Furanones produced by *Diplodia corticola*”
Journal of Natural Products, 2017, 80, 2406-2415

76. Marta De Zotti, Karen Wright, Edouard d'Aboville, Antonio Toffoletti, Claudio Toniolo, Giovanna Longhi, Giuseppe Mazzeo, Sergio Abbate, Fernando Formaggio
“Synthesis of Intrinsically Blue-Colored bis-Nitronyl Nitroxide Peptidomimetic Templates and Their Conformational Preferences as Revealed by a Combined Spectroscopic Analysis”
Journal of Organic Chemistry, 2017, 82, 10033-10042

77. Paola Rizzo, Sergio Abbate, Giovanna Longhi, Gaetano Guerra
“Circularly polarized luminescence of syndiotactic polystyrene”
Optical Materials, 2017, 73, 595-601

78. Simone Ghidinelli; Giovanna Longhi; Giuseppe Mazzeo; Sergio Abbate; Stefan E. Boiadjev; David A. Lightner

“On the aggregation of bilirubinoids in solution as evidenced by VCD and ECD spectroscopy and DFT calculations”

Chirality, 2018, 30, 19-28

79. Simone Ghidinelli; Giovanna Longhi; Giuseppe Mazzeo; Sergio Abbate; Stefan E. Boiadjev; David A. Lightner

Cover Image

Chirality, 2018, 30, 1-1 DOI: 10.1002/chir.22802

80. Pablo Reiné; Jose Justicia; Sara P. Morcillo; Giuseppe Mazzeo; Emilio Garcia-Fernandez; Antonio Rodriguez-Dieguez; Luis Álvarez de Cienfuegos; Sergio Abbate; Juan Manuel Cuerva; Giovanna Longhi; Delia Miguel

“Exploring potentialities and limitations of stapled o-oligo(phenyleneethynylene)s (o-OPEs) as efficient circularly polarized luminescence emitters”

Chirality, 2018, 30, 43-54

81. Nadia Alessandra Carmo dos Santos; Elena Badetti; Giulia Licini; Sergio Abbate; Giovanna Longhi; Cristiano Zonta

“A stereodynamic fluorescent probe for amino acids. Circular dichroism and circularly polarized luminescence analysis”

Chirality, 2018, 30, 65-73

83. Juan M. Cuerva, Sandra Resa, Delia Miguel, Santiago Guisán-Ceinos, Giuseppe Mazzeo, Duane Choquesillo-Lazarte, Sergio Abbate, Luis Crovetto, Diego J. Cárdenas, M. Carmen Carreño, María Ribagorda, Giovanna Longhi, Antonio J. Mota, and Luis Álvarez de Cienfuegos

"Sulfoxide-Induced Homochiral Folding of o-OPEs by Ag(I) Templating: Structure and Chiroptical Properties"

Chemistry a European Journal 2018, 24, 2653-2662

84. Sergio Abbate, Carlo Bertucci, Lorenzo Di Bari, Gennaro Pescitelli, Nina Berova, John Caldwell

“Editor’s Note for: Special Issue “Chiroptical Spectroscopy: Instrumentation, Experimental Aspects and Applications” in memory of Ettore Castiglioni”

Chirality, 2018, 30, 226-226

85. Martina Miceli, Andrea Mazziotta, Chiara Palumbo, Elia Roma, Eleonora Tosi, Giovanna Longhi, Sergio Abbate, Paolo Lupattelli, Giuseppe Mazzeo, Tecla Gasperi

“Asymmetric Synthesis of Spirooxindoles via Nucleophilic Epoxidation Promoted by Bifunctional Organocatalysts”

Molecules 2018, 23, 438

86. Javier Cerezo, Daniel Aranda, Francisco J. Avila Ferrer, Giacomo Prampolini, Giuseppe Mazzeo, Giovanna Longhi, Sergio Abbate, Fabrizio Santoro

“Toward a general mixed quantum/classical method for the calculation of the vibronic ECD of a flexible dye molecule with different stable conformers: Revisiting the case of 2,2,2-trifluoro-anthrylethanol”

Chirality 2018, 30, 730-743

87. Pablo Reiné, Jose Justicia, Sara P. Morcillo, Sergio Abbate, Belen Vaz, María Ribagorda, Ángel Orte, Luis Álvarez de Cienfuegos, Giovanna Longhi, Araceli G. Campaña, Delia Miguel, Juan M. Cuerva

“Pyrene-Containing ortho-Oligo(phenylene)ethynylene Foldamer as a Ratiometric Probe Based on Circularly Polarized Luminescence”

Journal of Organic Chemistry 2018, 83, 4455–4463

88. Tiziana Benincori, Giulio Appoloni, Patrizia Romana Mussini, Serena Arnaboldi, Roberto Cirilli, Elsa Quartapelle Procopio, Monica Panigati, Sergio Abbate, Giuseppe Mazzeo, Giovanna Longhi

“Searching for Models Exhibiting High Circularly Polarized Luminescence: the Electroactive Inherently Chiral Oligothiophenes”

Chemistry a European Journal 2018, 24, 11082-11093

89. Zoe Domínguez, Rocío López-Rodríguez, Eleuterio Álvarez, Sergio Abbate, Giovanna Longhi, Uwe Pischel, Abel Ros

“Azabore[5]helicene Charge-Transfer Dyes Show Efficient and Spectrally Variable Circularly Polarized Luminescence”

Chemistry a European Journal 2018, 24, 12660-12668

90. Stefania Vergura, Ernesto Santoro, Marco Masi, Antonio Evidente, Patrizia Scafato, Stefano Superchi, Giuseppe Mazzeo, Giovanna Longhi, Sergio Abbate

“Absolute configuration assignment to anticancer Amaryllidaceae alkaloid jonquailine”

Fitoterapia 2018, 129, 78-84

91. Giuseppe Mazzeo, Giovanna Longhi, Sergio Abbate, Francesca Mangiavacchi, Claudio Santi, Jianlin Han, Vadim A. Soloshonok, Luca Melensi, Renzo Ruzziconi

“Mannich-type addition of 1,3-dicarbonyl compounds to chiral tert-butanesulfinyltrifluoroacetaldimines. Mechanistic aspects and chiroptical studies”

Organic & Biomolecular Chemistry 2018, 16, 8742-8750

92. Pablo Reiné, Ana M. Ortuño, Sandra Resa, Luis Álvarez de Cienfuegos, Victor Blanco, M. José Ruedas-Rama, Giuseppe Mazzeo, Sergio Abbate, Andrea Lucotti, Matteo Tommasini, Santiago Guisán-Ceinos, María Ribagorda, Araceli G. Campaña, Antonio Mota, Giovanna Longhi, Delia Miguel, Juan M. Cuerva

“OFF/ON switching of circularly polarized luminescence by oxophilic interaction of homochiral sulfoxide-containing o-OPEs with metal cations”

Chemical Communications 2018, 54, 13985-13988

93. Simone Ghidinelli, Sergio Abbate, Stefan E. Boiadjev, David A. Lightner, Giovanna Longhi

“l-Stercobilin-HCl and d-Urobilin-HCl. Analysis of Their Chiroptical and Conformational Properties by VCD, ECD, and CPL Experiments and MD and DFT Calculations”

94. Sergio Abbate, Giuseppe Mazzeo, Giovanna Longhi

“NIR-absorption and NIR-VCD spectroscopy can teach us a lot about OH bonds”

Rendiconti Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL-Memorie di Scienze Fisiche e Naturali 136° (2018), Vol. XLII, Parte II, Tomo II, pp. 73-80

95. Serena Arnaboldi, Tiziana Benincori, Andrea Penoni, Luca Vaghi, Roberto Cirilli, Sergio Abbate, Giovanna Longhi, Giuseppe Mazzeo, Sara Grecchi, Monica Panigati, Patrizia Romana Mussini

“Highly Enantioselective "Inherently Chiral" Electroactive Materials Based on the 2,2'-Biindole Atropisomeric Scaffold”

Chemical Sciences 2019, 10, 2708-2717

96. Sergio Abbate, Giovanna Longhi, Giuseppe Mazzeo, Claudio Villani, Silvija Petković, Renzo Ruzziconi

“CF 3: An overlooked chromophore in VCD spectra. A review of recent applications in structural determination”

RSC Advances 2019, 9, 11781-11796

97. Simone Ghidinelli, Giovanna Longhi, Sergio Abbate, Stefan E. Boiadjev, David A. Lightner

“Bilirubin and its congeners: conformational analysis and chirality from metadynamics and related computational methods”

Monatshefte fuer Chemie-Chemical Monthly 2019, doi.org/10.1007/s00706-019-02411-9

98. Angela Patti, Sonia Pedotti, Giuseppe Mazzeo, Giovanna Longhi, Sergio Abbate, Lorenzo Paoloni, Julien Bloino, Sergio Rampino, Vincenzo Barone

“Ferrocenes with simple chiral substituents: an in-depth theoretical and experimental VCD and ECD study”

Physical Chemistry Chemical Physics 2019, DOI: 10.1039/c9cp00437h

