

**POSIZIONE ATTUALE**

La Prof.ssa Concetta De Stefano è Professore Ordinario di Chimica Analitica SSD CHIM/01 – Chimica Analitica, presso il Dipartimento di Scienze Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche e Ambientali (CHIBIOFARAM) dell'Università di Messina

**ESPERIENZA PROFESSIONALE**

- (dal 2001 – a oggi) Professore Ordinario di Chimica Analitica SC 03/A1 – SSD CHIM/01  
Dipartimento di Scienze Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche e Ambientali (CHIBIOFARAM)-  
Università di Messina -
- (dal 1/11/1998 – al 2001) Professore Associato di Chimica Analitica SC 03/A1 – SSD CHIM/01  
Università di Messina
- (dal 2/07/1990 – 31/10/1998) Ricercatore Universitario di Chimica Analitica SC 03/A1 – SSD CHIM/01  
Università di Messina -
- (dal 1986– 1988) Chimico  
presso l'industria agrumaria "SPEDA Roccalumera" di Messina

**ISTRUZIONE E FORMAZIONE**

- 1983/1986 Borsa di Studio Formez  
Stazione sperimentale delle essenze e dei derivati dagli agrumi di Reggio Calabria
- (26/06/1982) Laurea magna cum laude in Chimica  
Università di Messina -
- (luglio 1977) Diploma di maturità scientifica 60/60  
Liceo scientifico "G. Seguenza" Messina -

**INCARICHI**

La prof.ssa De Stefano ha ricoperto i seguenti incarichi:

- Presidente della Commissione Orientamento e Tutorato del Dipartimento CHIBIOFARAM dal 2018 a oggi.
- Componente della commissione di Ateneo per il riconoscimento dei 24 CFU.
- Componente dal 2017 della commissione scientifica dell'Università di Messina per la bonifica della Zona Falcata.
- Membro della ASN per il SC 03/A1 2016-2018.
- Presidente della Struttura Interdipartimentale di Raccordo (SIR) "Facoltà di Scienze e Tecnologie" dal 2013 al 2016.
- Vice direttore del Dipartimento di Scienze Chimiche -Università di Messina (2013 - 2015).
- Membro eletto del Direttivo di Chimica Analitica della SCI dal 2013-2018.
- Vice direttore del Dipartimento di Chimica Inorganica, Chimica Analitica e Chimica Fisica – Università di Messina (2007-2012).
- Coordinatore della classe di Scienze Naturali della SISSIS di Messina.
- Membro del Advisor Board of Journal of Chemical and Engeneering Data (2004 - 2009).
- Chairman del master di II livello "Eurofos" Master in Forensic Sciences – University of Messina (2001).

**ATTIVITA' DIDATTICA**

La Prof.ssa De Stefano dal 1995 ha insegnato discipline dei SSD CHIM/01 e CHIM/12. In particolare nell' AA2018/19 le sono stati assegnati i seguenti corsi: Chimica Analitica (6 CFU) e Monitoraggio Ambientale (4 CFU) per il CdS in Chimica Triennale; Tecnologie di caratterizzazione e controllo di qualità (6 CFU); Metodologie didattiche per l'insegnamento della Chimica Analitica (2CFU) per il CdS in Chimica Magistrale;  
Dal 1995 ha insegnato: Chimica Analitica con Laboratorio, Chimica dell'Ambiente, Controllo di qualità e validazione dei metodi in chimica analitica e Chimica Analitica IV per il CdS in Chimica; Tecnologie di caratterizzazione e controllo di qualità e Controllo di processo per il CdS in Chimica Industriale; Caratterizzazione e Bonifica dei Siti Contaminati per il CdS GERIT.

**ATTIVITA' DI RICERCA**

La sua attività di ricerca ha riguardato le seguenti tematiche:

- Analisi di equilibrio con particolare riferimento alla speciazione di fluidi biologici e naturali;
- costruzione di programmi di calcolo per l'analisi dei dati di equilibrio;
- studio delle proprietà acido-base di differenti classi di leganti (poliammine, poliacarbossilati, amminoacidi, complessioni);
- idrolisi di cationi metallici e organometallici;
- chimica supramolecolare (interazione di poliammine con anioni organici e inorganici);
- sequestrazione di metalli tossici con leganti biodegradabili selettivi;
- complessi deboli (formazione di coppie ioniche deboli) di metalli alcalini e alcalino con leganti organici ed inorganici;
- speciazione di leganti naturali, come acido fitico e glutatione;
- studi di speciazione di fluidi naturali e biologici (descrizione quantitativa delle specie in un sistema multicomponente, usando metodi statistici e matematici)

**PUBBLICAZIONI E PARAMETRI BIBLIOMETRICI**

La prof.ssa De Stefano ha pubblicato più di 260 papers (H-index = 32; Total No. of Citazioni = 4209) su riviste internazionali e n. 3 capitoli di libro. La sua attività di ricerca è stata svolta spesso in collaborazione con colleghi di Università italiane e straniere.

**FONDI**

La prof.ssa De Stefano è titolare dei seguenti fondi:

- PRIN 2015 - "*Multiple equilibria in natural and biological fluids: from speciation to selective sequestering*" – responsabile dell'unità di ricerca di UNIME (2015 - prot. 2015MP34H3).
- Bando "Research&Mobility" 2017 ARCADIA - smARt materials for landfill leachate remediation (€ 74 643.00)

**ISTA DELLE PUBBLICAZIONI (2014-2019)**

1. Bergamasco, A., et al., *Composition, Distribution, and Sources of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Sediments of the Gulf of Milazzo (Mediterranean Sea, Italy)*. Polycyclic Aromatic Compounds, 2014. **34**(4): p. 397-424.
2. Bretti, C., et al., *Thermodynamics for proton binding of pyridine in different ionic media at different temperatures*. Journal of Chemical and Engineering Data, 2014. **59**(1): p. 143-156.
3. Bretti, C., et al., *The effect of the tetraalkylammonium salts on the protonation thermodynamics of the phytate anion*. Fluid Phase Equilibria, 2014. **383**: p. 126-133.
4. Bretti, C., et al., *Solubility, activity coefficients, and protonation sequence of risedronic acid*. Journal of Chemical and Engineering Data, 2014. **59**(11): p. 3728-3740.
5. Cigala, R.M., et al., *Acid-base properties and alkali and alkaline earth metal complex formation in aqueous solution of diethylenetriamine- N, N, N', N'', N'''-pentakis(methylenephosphonic acid) obtained by an efficient synthetic procedure*. Industrial and Engineering Chemistry Research, 2014. **53**(23): p. 9544-9553.
6. Crea, F., et al., *Chelating agents for the sequestration of mercury(II) and monomethyl mercury(II)*. Current Medicinal Chemistry, 2014. **21**(33): p. 3819-3836.
7. Cucinotta, D., et al., *Formation, stability and empirical relationships for the binding of Sn<sup>2+</sup> by O-, N- and S-donor ligands*. Journal of Molecular Liquids, 2014. **200**(PB): p. 329-339.
8. De Stefano, C., et al., *Acid-base and UV behavior of 3-(3,4-dihydroxyphenyl)-propenoic acid (caffeic acid) and complexing ability towards different divalent metal cations in aqueous solution*. Journal of Molecular Liquids, 2014. **195**: p. 9-16.
9. De Stefano, C., et al., *Evaluation of the sequestering ability of different complexones towards Ag<sup>+</sup> ion*. Journal of Molecular Liquids, 2014. **199**: p. 432-439.

10. De Stefano, C., et al., *Sequestering ability of aminopolycarboxylic (APCs) and aminopolyphosphonic (APPs) ligands toward palladium(II) in aqueous solution*. Journal of Chemical and Engineering Data, 2014. **59**(6): p. 1970-1983.
11. Bretti, C., et al., *Thermodynamics of Zn<sup>2+</sup> and 2-mercaptopyridine-N-oxide and 2-hydroxypyridine-N-oxide interactions: Stability, solubility, activity coefficients and medium effects*. Journal of Molecular Liquids, 2015. **211**: p. 876-884.
12. Bretti, C., et al., *Solubility and modeling acid-base properties of adrenaline in NaCl aqueous solutions at different ionic strengths and temperatures*. European Journal of Pharmaceutical Sciences, 2015. **78**: p. 37-46.
13. Bretti, C., et al., *On the interaction of phytate with proton and monocharged inorganic cations in different ionic media, and modeling of acid-base properties at low ionic strength*. Journal of Chemical Thermodynamics, 2015. **90**: p. 51-58.
14. Cigala, R.M., et al., *Zinc(II) complexes with hydroxocarboxylates and mixed metal species with tin(II) in different salts aqueous solutions at different ionic strengths: Formation, stability, and weak interactions with supporting electrolytes*. Monatshefte fur Chemie, 2015. **146**(4): p. 527-540.
15. Cigala, R.M., et al., *Modelling the Hydrolysis of Mixed Mono-, Di- and Trimethyltin(IV) Complexes in Aqueous Solutions*. Journal of Solution Chemistry, 2015. **44**(8): p. 1611-1625.
16. Cigala, R.M., et al., *Thermodynamic data for the modeling of lanthanoid(III) sequestration by reduced glutathione in aqueous solution*. Journal of Chemical and Engineering Data, 2015. **60**(1): p. 192-201.
17. Crea, F., et al., *SALMO and S<sub>3</sub>M: A saliva model and a single saliva salt model for equilibrium studies*. Bioinorganic Chemistry and Applications, 2015. **2015**.
18. Bretti, C., et al., *Polycarboxylic acids in sea water: acid-base properties, solubilities, activity coefficients, and complex formation constants at different salinities*. Monatshefte fur Chemie, 2016. **147**(9): p. 1481-1505.
19. Bretti, C., et al., *Understanding the bioavailability and sequestration of different metal cations in the presence of a biodegradable chelant S,S-EDDS in biological fluids and natural waters*. Chemosphere, 2016. **150**: p. 341-356.
20. Bretti, C., et al., *Acid-base and thermodynamic properties of d-gluconic acid and its interaction with Sn<sup>2+</sup> and Zn<sup>2+</sup>*. Journal of Chemical and Engineering Data, 2016. **61**(6): p. 2040-2051.
21. Bretti, C., et al., *Thermodynamic Study on the Protonation and Complexation of GLDA with Ca<sup>2+</sup> and Mg<sup>2+</sup> at Different Ionic Strengths and Ionic Media at 298.15 K*. Journal of Chemical and Engineering Data, 2016. **61**(5): p. 1895-1903.
22. Crea, F., et al., *Alkali Metal Ion Complexes with Phosphates, Nucleotides, Amino Acids, and Related Ligands of Biological Relevance. Their Properties in Solution*, in *Metal Ions in Life Sciences*. 2016. p. 133-166.
23. De Stefano, C., et al., *Complexation of Hg<sup>2+</sup>, CH<sub>3</sub>Hg<sup>+</sup>, Sn<sup>2+</sup> and (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Sn<sup>2+</sup> with phosphonic NTA derivatives*. New Journal of Chemistry, 2016. **40**(2): p. 1443-1453.
24. Bretti, C., et al., *Thermodynamic Properties of O-Donor Polyelectrolytes: Determination of the Acid-Base and Complexing Parameters in Different Ionic Media at Different Temperatures*. Journal of Chemical and Engineering Data, 2017. **62**(9): p. 2676-2688.
25. Bretti, C., et al., *Understanding the bioavailability and sequestration of different metal cations in the presence of a biodegradable chelant MGDA in biological fluids and natural waters*. Chemosphere, 2017. **183**: p. 107-118.
26. Bretti, C., et al., *Thermodynamic solution properties of a biodegradable chelant (MGDA) and its interaction with the major constituents of natural fluids*. Fluid Phase Equilibria, 2017. **434**: p. 63-73.
27. Bretti, C., et al., *Thermodynamics (Solubility and Protonation Constants) of Risedronic Acid in Different Media and Temperatures (283.15–318.15 K)*. Journal of Solution Chemistry, 2017. **46**(9-10): p. 1903-1927.
28. Cardiano, P., et al., *On the complexation of metal cations with "pure" diethylenetriamine-N,N,N',N''-pentakis(methylenephosphonic) acid*. New Journal of Chemistry, 2017. **41**(10): p. 4065-4075.
29. Cardiano, P., et al., *Potentiometric, UV and 1H NMR study on the interaction of penicillin derivatives with Zn(II) in aqueous solution*. Biophysical Chemistry, 2017. **223**: p. 1-10.
30. Cigala, R.M., et al., *Thermodynamic Parameters for the Interaction of Amoxicillin and Ampicillin*

- with Magnesium in NaCl Aqueous Solution, at Different Ionic Strengths and Temperatures.* Journal of Chemical and Engineering Data, 2017. **62**(3): p. 1018-1027.
31. Crea, F., et al., *Modeling the acid-base properties of molybdate(VI) in different ionic media, ionic strengths and temperatures, by EDH, SIT and Pitzer equations.* Journal of Molecular Liquids, 2017. **229**: p. 15-26.
  32. Bretti, C., et al., *Exploring various ligand classes for the efficient sequestration of stannous cations in the environment.* Science of the Total Environment, 2018. **643**: p. 704-714.
  33. Bretti, C., et al., *Solubility, acid-base properties and thermodynamics of interaction between three NTA-phosphonate derivatives and the main cationic components (H<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, Mg<sup>2+</sup> and Ca<sup>2+</sup>) of natural fluids.* Journal of Chemical Thermodynamics, 2018. **123**: p. 117-127.
  34. Cardiano, P., et al., *Sequestration of HEDPA, NTA and phosphonic NTA derivatives towards Al<sup>3+</sup> in aqueous solution.* Journal of Molecular Liquids, 2018. **261**: p. 96-106.
  35. Cigala, R.M., et al., *Use of Gantrez Copolymers as Potential Chelating Agent for the Selective Sequestration of Metal Ions. Studies of the Interactions in Aqueous Solution at Different Ionic Strengths and Temperatures.* Journal of Chemical and Engineering Data, 2018. **63**(11): p. 4193-4204.
  36. Crea, F., et al., *Phytate-molybdate(vi) interactions in NaCl(aq) at different ionic strengths: Unusual behaviour of the protonated species.* New Journal of Chemistry, 2018. **42**(10): p. 7671-7679.
  37. Irto, A., et al., *New bis-(3-hydroxy-4-pyridinone)-NTA-derivative: Synthesis, binding ability towards Ca<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>, Al<sup>3+</sup>, Fe<sup>3+</sup> and biological assays.* Journal of Molecular Liquids, 2018. **272**: p. 609-624.
  38. Irto, A., et al., *Bifunctional 3-hydroxy-4-pyridinones as effective aluminium chelators: synthesis, solution equilibrium studies and in vivo evaluation.* Journal of Inorganic Biochemistry, 2018. **186**: p. 116-129.
  39. Majlesi, K., et al., *Thermodynamic Study on the Protonation and Na<sup>+</sup>, Ca<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup>-Complexation of a Biodegradable Chelant (HEIDA) at Different Ionic Strengths and Temperatures.* Journal of Solution Chemistry, 2018. **47**(3): p. 528-543.
  40. Majlesi, K., et al., *Complexation of Molybdenum(VI) with GLDA at Different Ionic Strengths.* Journal of Solution Chemistry, 2018. **47**(12): p. 1965-1979.
  41. Bretti, C., et al., *Thermodynamic study on polyaspartic acid biopolymer in solution and prediction of its chemical speciation and bioavailability in natural fluids.* Journal of Molecular Liquids, 2019. **274**: p. 68-76.
  42. Cardiano, P., et al., *Characterization of the thermodynamic properties of some benzenepolycarboxylic acids: Acid-base properties, weak complexes, total and neutral species solubility, solubility products in NaCl<sub>a</sub>, (CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>NCl<sub>aq</sub> and Synthetic Sea Water (SSW).* Fluid Phase Equilibria, 2019. **480**: p. 41-52.
  43. De Stefano, C., et al., *Prediction of water solubility and Setschenow coefficients by tree-based regression strategies.* Journal of Molecular Liquids, 2019. **282**: p. 401-406.
  44. Irto, A., et al., *A new bis-(3-hydroxy-4-pyridinone)-DTPA-derivative: Synthesis, complexation of di-/tri-valent metal cations and in vivo M<sup>3+</sup> sequestering ability.* Journal of Molecular Liquids, 2019. **281**: p. 280-294.