

ALL. B

Decreto Rettore Università di Roma “La Sapienza” n 2248/2021 del 06/08/2021

ALESSANDRO MOTTA Curriculum Vitae

Luogo: Roma

Data: 11/10/2021

I - INFORMAZIONI GENERALI

Nome e cognome	Alessandro Motta
----------------	------------------

II - PERCORSO FORMATIVO

- 1995 **Diplomato** presso il liceo scientifico “G. Galilei” di Catania nel luglio 1995, con la votazione finale di 54/60.
- 1995-2001 **Laurea** quinquennale in Chimica presso l’Università di Catania; Titolo ricevuto il 21 aprile 2001 presentando la tesi: *Modellizzazione quantomeccanica di sistemi inorganici con proprietà funzionali*. Relatore: Prof Ignazio L. Fragalà.
- 2002-2004 **Dottorato in Scienza dei Materiali (XVII ciclo)**, Titolo di dottore di ricerca ricevuto presso l’Università di Padova il 22 marzo 2005;
Tesi: *Meccanismi di reazione di processi catalitici. Un approccio teorico*.
Supervisore: Prof Ignazio L. Fragalà.

Durante le attività di ricerca, la sua formazione riguardante le tecniche computazionali si è ampliata attraverso la partecipazione a due scuole (*Scuola Nazionale in Simulazioni Computazionali Multiscala Applicate alle Scienze Dei Materiali* tenutasi a Modena nel 2003 e la *European Summerschool* su “*Ab initio Modeling in Solid State Chemistry*” tenutasi a Torino nel 2003), un tutorial frequentato a Zurigo presso la sede CECAM dell’ETHZ nel 2011 e un periodo di training presso il gruppo del prof. Peter Blaha del Theoretische Chemie Gruppe Technische Universität Wien - Institut für Materialchemie di Vienna nel 2012.

Inoltre, le sue conoscenze riguardo le tecniche sperimentali sono state approfondite attraverso la partecipazione a due edizioni (la IX e la X) della scuola nazionale di scienza dei materiali frequentate a Genova nel 2001 e a Sestri levante nel 2004, rispettivamente.

III A - PERCORSO PROFESSIONALE

- 2001 **Abilitato alla professione di Chimico** nella seconda sessione del 2001 presso l'Università degli Studi di Catania (Num. Reg: 020085200025; Matricola: 008/010157).
- 2001_{Ago}-2001_{Dic} **Collaborazione coordinata e continuativa** post-laurea –presso l'Università di Catania.
- Responsabile del progetto: Prof. Ignazio L. Fragalà
- Programma di ricerca: ‘ *Modeling di sistemi molecolari per lo sviluppo della chimica computazionale*’
- 2005_{Feb}-2005_{Mag} **Incarico di collaborazione a progetto** post-dottorato stipulato con il consorzio INSTM presso l'unità di ricerca di Catania all'interno del Progetto FIRB, codice “FIRBUC1FRA” (coordinatore Prof. Renato Ugo)
- Supervisore di unità: Prof. Ignazio L. Fragalà
- Programma di ricerca: “*Studio di sistemi ibridi organici-inorganici ancorati su superfici di interesse tecnologico*”
- 2005_{Mag}-2007_{Apr} **Assegno di ricerca** – svolto presso l'Università di Catania. Prot. n. 27926/VIII/2
- Supervisore: Prof. Ignazio L. Fragalà
- Programma di ricerca: ‘ *Sintesi e caratterizzazione di monolayer funzionalizzati su superfici di silicio*’
- 2007_{Mag}-2009_{Apr} **Incarico di collaborazione** post-dottorato stipulato con il consorzio INSTM presso l'unità di ricerca di Catania all'interno del Progetto FIRB d.d. 7/11/2002 (coordinatore Prof. Dante Gatteschi)
- Responsabile di unità: Prof. Ignazio L. Fragalà
- Programma di ricerca: ‘ *Sintesi e caratterizzazione di sistemi ibridi organici/inorganici nanostrutturati su substrati di silicio*’
- 2009_{Mag}-Ora **Ricercatore tirocinante INSTM** dipendente a tempo indeterminato del consorzio INSTM presso l'unità di ricerca di Catania con distacco presso l'Università Sapienza di Roma.
- 2011_{Nov}-2012_{Feb} **LPCS-ENSCP Post-Doctoral Fellowship** all'interno del progetto FRESCORT.
- Supervisore : Prof. Philippe Marcus, ENSCP.
- Progetto: “*Influence des propriétés de nano-rugosité, caractère acide-base et degré d'hydratation de surfaces TiO2 sur l'adhésion d'amines*”
- 2013_{gen}-2013_{apr} **Post doctoral fellow** stipulato con il Department of Chemistry, Northwestern University, Evanston - IL - USA
- Responsabile del progetto: Prof. Tobin J. Marks
- Programma di ricerca: “*theoretical modeling of reaction mechanism in homogeneous and heterogeneous single site catalysis*”
- 2013 **Abilitato al ruolo di professore di seconda fascia settore 03/B1** al bando 2012 (DD n. 222/2012) superando la selezione con tre parametri su tre (art. norm.: 32.22; cit. norm.: 56.22; H_{index} cont.: 12) sopra le mediane di riferimento. Validità dal 23/12/2013 al 23/12/2019.
- 2016 **Abilitato al ruolo di professore di seconda fascia settore 03/B2** al bando 2016 (DD n. 1532/2016) superando la selezione con tre parametri su tre sopra le mediane di riferimento (indicatore 1: 27/14; indicatore 2: 815/269; indicatore 3: 18/10. Validità dal 28/03/2017 al 28/03/2023.
- 2017 **Abilitato al ruolo di professore di PRIMA fascia settore 03/B1** al bando 2016 (DD n. 1532/2016) superando la selezione con tre parametri su tre sopra le mediane di riferimento (indicatore 1: 42/28; indicatore 2: 1173/732; indicatore 3: 21/15. Validità dal 05/12/2017 al 05/12/2023.

2019 **Abilitato al ruolo di professore di seconda fascia settore 03/B1** al bando 2019 (DD:1532/2016) superando la selezione con tre parametri su tre (ind.1: 27/14; ind. 2: 815/269; ind. 3: 18/10) sopra le mediane di riferimento. Validità dal 10/09/2019 al 10/09/2025.

III B - ATTIVITÀ DI FORMAZIONE E DI RICERCA PRESSO ISTITUTI STRANIERI

Le attività di ricerca e di formazione gli hanno permesso di entrare in contatto con diverse strutture in Europa e negli Stati Uniti di riconosciuto spessore scientifico:

- **Department of Chemistry-Northwestern University.** Da Gennaio ad Aprile 2013 (tre mesi) ha collaborato sotto la supervisione del Prof. Tobin Marks presso i suoi laboratori all'interno del programma di ricerca "*theoretical modeling of reaction mechanism in homogeneous and heterogeneous single site catalysis*"
- **Laboratoire de Physico-Chimie des Surfaces (UMR 7045), ENSCP, Paris.** Ha collaborato con la dott. Dominique Costa e con il direttore Philippe Marcus presso i locali dell'LPCS, all'interno dei progetti HPC-Europa2 per gli anni 2010 (tre mesi), 2011 (due mesi) e 2012 (tre mesi) e a cavallo del 2011-2012 (tre mesi) all'interno del progetto FRESCORT.
- **Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement, LAMBE UMR CNRS 8587, Université Evry val d'Essonne.** Ha collaborato con la Prof. Marie-Pierre Gageot presso i suoi laboratori nel 2010 (un mese) all'interno del progetto europeo HPC-Europa2.
- **Theoretische Chemie Gruppe Technische Universität Wien - Institut für Materialchemie, Wien.** Da Settembre ad Ottobre 2012 ha lavorato presso i laboratori del Prof. Peter Blaha, all'interno di un programma di ricerca finanziato dal CNRS (responsabile Dr. Frederik Tielens, UMR 7197, Université Pierre et Marie Curie) con l'obiettivo di imparare i metodi computazionali di analisi full electron di sistemi periodici.

IV - ESPERIENZE DIDATTICHE

- titolare dell'insegnamento di chimica generale ed inorganica (SC: 03/B1, SSD: CHIM/03) per il corso triennale di scienze biologiche (Facoltà di Scienze MM FF NN) nei seguenti anni:

A.A.	Sem.	Modalità	CFU	Ore frontali	Frequentanti	Gradimento*
15/16	I	In convenzione	9	76	≈110	91.7%
16/17	I	In convenzione	9	76	≈110	92.4%
17/18	I	In convenzione	9	84	≈110	95.4%
18/19	I	In convenzione	9	84	≈110	88.2%
19/20	I	In convenzione	9	84	≈110	79.3%
20/21	I	A contratto	9	84	≈110	91.2%
21/22	I	A contratto	9	84	≈110	

*Somma delle percentuali di studenti che hanno risposto "*decisamente sì*" e "*più sì che no*" alla domanda "Sono complessivamente soddisfatto di come è stato svolto questo insegnamento?" sui questionari OPIS

- docente a contratto dell'insegnamento "*Laboratorio di Formulazioni*" per il Master di primo livello in "Tecnologie innovative per il rilevamento del degrado e la progettazione del restauro dei BB.CC." presso il dipartimento di chimica dell'Università di Catania per l'anno accademico **2007-2008**.
- Ha svolto un seminario dal titolo "Raggi atomici e legame chimico applicati allo stato solido" per l'insegnamento di *Chimica Inorganica II* negli anni accademici **2009-2010** e **2010-2011** e per il corso di *Chimica Inorganica I* per l'anno accademico **2011-2012** presso l'Università di Catania.
- Ha svolto un seminario dal titolo "Composti organometallici per applicazioni catalitiche" all'interno dell'insegnamento di *Metallorganica* negli anni accademici **2006-2007**, **2007-2008** e **2008-2009** presso l'università di Catania.
- È stato correlatore per le seguenti tesi magistrali:
 1. "la riduzione dell'ossido di grafene: uno studio sulla correlazione tra struttura e reattività chimica" presentata da Irene Ferrari presso il dip. di Chimica, Università Sapienza di Roma nell'A.A. **2020-2021**;
 2. "Studio di fotoemissione a raggi X della natura superidrofobica di depositi fluorurati su allumina nanostrutturata" presentata da Giorgia evangelista presso il dip. Di Chimica, Università Sapienza di Roma nell'AA **2014-2015**.
- Ha svolto il ruolo di tutor per la realizzazione delle seguenti tesi triennali:
 1. "Preparazione di monostrati molecolari su silicio (100)" presentata da Emanuele Smecca presso il Dip. di Chimica, Università di Catania, nell'AA **2004-2005** (Relatore: Prof. Guido G. Condorelli);
 2. "Studio chimico-strutturale di monolayer organici covalentemente legati su Si(100)" presentata da Gisella Puglisi presso il Dip. di Chimica, Università di Catania, nell'AA **2008-2009** (Relatore: Prof. Guido G. Condorelli);
 3. "Studio xps di superfici superidrofobiche/superoleofobiche ottenute su allumina nanostrutturata" presentata da Oliviero Cannelli presso il dip. di Chimica, Università Sapienza di Roma nell'A.A. **2013-2014**
 4. "Superfici anfifobiche studiate mediante XPS" presentata da Sony Luis Katengo presso il dip. di Chimica, Università Sapienza di Roma nell'A.A **2014-2015**;
- Ha svolto il ruolo di tutor per le seguenti tesi magistrali:
 1. "Riconoscimento Molecolare su Silicio" presentata da Ettore Guerrieri presso il Dipartimento di Chimica, Università di Catania, nell'AA **2008-2009** (Relatore: Prof. Guido G. Condorelli);
 2. "Funzionalizzazione Covalente di Nano-particelle di Carbonio" presentata da Loredana M. C. Russo presso il Dip. di Chimica, Università di Catania, nell'AA **2010-2011** (Relatore: Prof. Guido G. Condorelli);
- Ha svolto il ruolo di tutor per le seguenti tesi di dottorato di ricerca:
 1. "Site-Specific Anchoring of Tetrairon (III) Single Molecule Magnets (SMMs) on Silicon (100) Surface" presentata da Giovanna Pellegrino presso il Dip. di Chimica,

Università di Catania, per il conseguimento del Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche XX ciclo (triennio **2004-2007**, Supervisore: Prof. Guido G. Condorelli);

2. “Cavitand-based monolayers on Si (100) surface for molecular recognition and nanoreplication” presentata da Maria Favazza presso il Dip. di Chimica, Università di Catania, per il conseguimento del Dottorato di Ricerca in Scienza dei Materiali XX ciclo (triennio **2004-2007**, Supervisore: Prof. Guido G. Condorelli);
 3. “Funzionalizzazione del Si (100) per l’ancoraggio di complessi inorganici” presentata da Alessandro Di Mauro presso il Dip. di Chimica, Università di Catania, per il conseguimento del Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche XX ciclo (triennio **2004-2007**, Supervisore: Prof. Guido G. Condorelli).
 4. “Chemical Engineering of Silicon for Supramolecular Recognition” presentata da Cristina Tudisco presso il Dip. di Chimica, Università di Catania, per il conseguimento del Dottorato di Ricerca in Scienza dei Materiali XXIV ciclo (triennio **2008-2011**, Supervisore: Prof. Guido G. Condorelli);
- È stato invitato dalla Dr Dominique Costa a presentare un seminario dal titolo: “Nano-assembly of functional molecules on technological substrates for magnetic and sensing applications” presso il Laboratoire de Physico-Chimie des Surfaces - ENSCP, Paris, il 9 Luglio **2010**.
 - È stato invitato a presentare dal Prof. Robertino Zanoni un seminario dal titolo: “Metodi di calcolo DFT applicati a meccanismi di reazione in processi catalitici” presso il dipartimento di Chimica dell’Università La Sapienza di Roma, il 7 Marzo **2014**.

V – PREMI

Premio (100 dollari) come secondo classificato per miglior poster vinto con il contributo “CATALYTIC PROPERTIES OF ORGANOZIRCONIUM ADSORBATES ON γ -ALUMINA. A DFT STUDY” presentato durante l’International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis (ISHHCXIII) 16 – 21 Luglio, **2007** Berkeley (CA), USA.

VI A - PARTECIPAZIONE A PROGETTI

- Progetti vinti in qualità di principal investigator (PI):

2020_{Set}-2021_{Ott} **ISCRA grant, code: HP10CC5WSY.**

- Principal investigator: Alessandro Motta
- Progetto: *Cooperation effects of amino pendant catalysts on the chain transfer polymerization process (CTPCOOP)*
- grant: ore calcolo risorse HPC CINECA

2019_{Ott}-2020_{Lug} **ISCRA grant, code: HP10CXE6KL.**

- Principal investigator: Alessandro Motta
- Progetto: *Theoretical Insights on a biocompatible reduction route of graphene oxide by N-acetyl cysteine (RGONAC)*
- grant: ore calcolo risorse HPC CINECA

2018_{Feb}-2018_{Nov} **ISCRA grant, code: HP10CFRR9A.**

- Principal investigator: Alessandro Motta

- Progetto: *theoretical investigation of hydroboration/reduction of ketones, aldehydes, esters and amides using lanthanide catalysts (HYDROBOR)*
 - grant: ore calcolo risorse HPC CINECA
- 2017_{Mag}-2018_{Mar} **ISCRA grant, code: HP10CP3HMF.**
- Principal investigator: Alessandro Motta
 - Progetto: *Theoretical investigation of copper corroles: effects of ligand substituents on the electronic structure (CUCOR)*
 - grant: ore calcolo risorse HPC CINECA
- 2016_{Lug}-2017_{Mar} **ISCRA grant, code: HP10CRFT69.**
- Principal investigator: Alessandro Motta
 - Progetto: *Novel catalysts based on Mn complexes. A theoretical investigation of electronic properties (CATMAN)*
 - grant: ore calcolo risorse HPC CINECA
- 2015_{Lug}-2016_{Mar} **ISCRA grant, code: HP10CUWUWW.**
- Principal investigator: Alessandro Motta
 - Progetto: *Super-amphiphobic monolayers on alumina surface. A theoretical molecular model (FASONSUR)*
 - grant: ore calcolo risorse HPC CINECA
- 2014_{Lug}-2015_{Mar} **ISCRA grant, code: HP10CBHAYD.**
- Principal investigator: Alessandro Motta
 - Progetto: *Distinct Cooperative effects of Bimetallic Catalysts for olefin polymerization (BIMECAT)*
 - grant: ore calcolo risorse HPC CINECA
- 2013_{Lug}-2014_{Mar} **ISCRA grant, code: HP10C9RDDE.**
- Principal investigator: Alessandro Motta
 - Progetto: *Organometallic complex on surface. Theoretical characterization and catalytic activity (COMPSUR)*
 - grant: ore calcolo risorse HPC CINECA
- 2012_{Lug}-2013_{Mar} **ISCRA grant, code: HP10CPZK0T.**
- Principal investigator: prof. Ignazio L. Fragalà
 - Progetto: *adhesion properties of functional molecules on metal-oxide surfaces (ADHPRO)*
 - grant: ore calcolo risorse HPC CINECA
- 2012_{Set-Nov} **HPC-EUROPA2 transnational Access Programme - granted researcher presso il LPCS-ENSCP di Parigi.**
- Principal investigator: Alessandro Motta
 - Coordinatore del programma: Catherine Inglis, University of Edinburgh.
 - Progetto: *“Amine coverage on titanium oxide/solvent interface. A DFT molecular dynamics study”*
 - grant: ore calcolo risorse HPC CINES e rimborso soggiorno
- 2011_{Mag-Giu} **HPC-EUROPA2 transnational Access Programme - granted researcher presso il LPCS-ENSCP di Parigi.**
- Principal investigator: Alessandro Motta
 - Coordinatore del programma: Catherine Inglis, University of Edinburgh.
 - Progetto: *“Adsorption at the solid liquid interface revisited with ab initio MD”*
 - grant: ore calcolo risorse HPC CINES e rimborso soggiorno
- 2010_{Mag-Lug} **HPC-EUROPA2 transnational Access Programme - granted researcher presso il LPCS-ENSCP di Parigi.**
- Principal investigator: Alessandro Motta
 - Coordinatore del programma: Judy Hardy, University of Edinburgh.
 - Progetto: *“Glycine adsorption on boehmite surface”*
 - grant: ore calcolo risorse HPC CINES e rimborso soggiorno

I progetti **ISCRA** hanno portato complessivamente alla produzione di 25 articoli su riviste internazionali
I progetti **HPC-EUROPA2** hanno portato complessivamente alla produzione di 4 articoli su riviste internazionali

- Progetti nei quali ha lavorato in qualità di partecipante:
 - **PRIN 2015** codice Prot. 2015WBEP3H. Gestore di fondi per collaborazione esterna.
 - **PON 2012** “Ambition Power”, codice: PON01_00700, (6 mesi).
 - Rete Nazionale di Ricerca sulle nanoscienze (**ITALNANONET**, codice: RBPR055H2P. Supervisor: P. Rinaldo, (36 mesi).
 - **FIRB 2011**: Rete integrate per la Nano Medicina (RINAME). Supervisor Guido Condorelli (36 mesi).
 - **PRIN 2008** prot: 2008FZK5AC_005. Supervisor: D. Gatteschi, (18 mesi).
 - **PRISMA** bando 01/2007 finanziato dal INSTM. Supervisor: Guido G. Condorelli.
 - **FIRB 2007**, prot: FIRBUC1FRA, (36 mesi).
 - **PRIN 2005** prot: 2005031228_005, supervisor Prof. Dante Gatteschi, postdoc (8 mesi)
 - **PRA 2005**, supervisor Prof. Ignazio Fragalà
 - **PRA 2004**, supervisor Prof. Ignazio Fragalà
 - **FIRB 2003**, prot: RBNE033KMA. Supervisor Prof. Renato Ugo, (36 mesi)
 - **PRIN 2003**, prot: 2003039323_002. Supervisor Prof. Dante Gatteschi, (20 mesi)
 - **FIRB 2001** prot: RBNE01YLKN_005, (36 mesi)
 - **PRIN 2001**, prot: 2001038849_002. Supervisor Prof. Dante Gatteschi, (12 mesi)

VI B - ORGANIZZAZIONE DI EVENTI SCIENTIFICI

1. È stato membro del comitato direttivo e scientifico per l'organizzazione del “terzo forum nazionale di scienza dei materiali per giovani ricercatori” organizzato dal consorzio INSTM, Padova 22-24 marzo, 2010.
2. È stato membro del comitato direttivo e scientifico per l'organizzazione del “quarto forum nazionale di scienza dei materiali per giovani ricercatori” organizzato dal consorzio INSTM. Padova 28-30 maggio, 2012.
3. È stato membro del comitato direttivo e scientifico per l'organizzazione del “quinto forum nazionale di scienza dei materiali per giovani ricercatori” organizzato dal consorzio INSTM. Ischia 11-13 luglio, 2016.
4. È stato membro del comitato organizzatore e scientifico del “XI convegno nazionale sulla scienza e la tecnologia dei materiali” organizzato dal consorzio INSTM. Ischia 12-15 luglio, 2017.

VI C - COMUNICAZIONI A CONGRESSI

È stato coautore di 27 contributi presentati in congressi nazionali ed internazionali. Qui di seguito sono riportati solo i contributi degli ultimi 10 anni, evidenziando i contributi a cui ha partecipato come relatore e quelli su invito

1. “ADSORPTION AT THE SOLID LIQUID INTERFACE REVISITED WITH AB INITIO MD: THE CASE OF GLYCINE ON BOEHMITE”, **A. Motta**, M.-P. Gaigeot, D. Costa *9th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemist (WATOC)* July 17-22, 2011 Santiago de Compostela, (Spagna).
2. “ADSORPTION AT THE SOLID LIQUID INTERFACE REVISITED WITH AB INITIO MD: THE CASE OF GLYCINE ON BOEHMITE”, **A. Motta**, M.-P. Gaigeot, D. Costa *CECAM Workshop: Liquid/Solid interfaces: Structure and Dynamics from Spectroscopy and Simulations* 27-29 Giugno 2011, Lausanne, (Svizzera).
3. “1,2-DIAMINOETHANE ADSORPTION ONTO TiO₂ (101) AND TiO₂ (001) ANATASE SURFACES: THEORETICAL DFT STUDIES”, A. Hemeryck, **A. Motta**, D. Costa, C. Pereira-Nabais, J. Światowska, S. Zanna, F. Wiame, C. Gadois, P. Marcus *Journées Surfaces Interfaces (26ème édition)* 25-27 Gennaio, 2012 Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Saint-Aubin (Francia).

4. "GLICINE ADSORPTION AT THE SOLID LIQUID INTERFACE REVISITED BY AB INITIO MOLECULAR DYNAMICS" **A. Motta**, D. Costa, M.-P. Gageot, F. Mercuri *TAM 2012*, 25-27 Giugno, 2012 SARA-Amsterdam (Nederland). **Relatore su invito**
5. "DFT MODELING ON THE HYDROAMINATION/CICLIZATION REACTION CATALYZED BY GROUP-IV ORGANOMETALLICS BASED ON DIANIONIC "PINCER" LIGANDS", **A. Motta**, G. Giambastiani, I.L. Fragalà *245th ACS National Meeting & Exposition* 7-11 Aprile 2013, New Orleans, Luisiana (USA).
6. "INSIGHT INTO GROUP 4 METALLOCENIUM-MEDIATED OLEFIN POLYMERIZATION REACTION COORDINATES USING A METADYNAMICS APPROACH", **A. Motta**, I.L. Fragalà, T.J. Marks *IX Convegno Nazionale INSTM per la Scienza e la Tecnologia dei Materiali*, 30 Giugno –3 Luglio, 2013, Bari, (Italia).
7. "ORGANOLANTHANIDE-CATALYZED ATOM-EFFICIENT AND REGIOSELECTIVE DEAROMATIZATION OF SUBSTITUTED AROMATIC N-HETEROCYCLES", M. Delferro, A. S. Dudnik, V. L. Weidner, **A. Motta**, T. J. Marks. *247th ACS National Meeting & Exposition 16-20 Marzo 2014, Dallas, Texas (USA)*.,
8. "HETEROBIMETALLIC EFFECTS FOR ENHANCED A-OLEFIN INCORPORATION IN ETHYLENE POLYMERIZATION CATALYSIS", M. Delferro, S. Liu, **A. Motta**, A. R. Mouat, T. J. Marks. *247th ACS National Meeting & Exposition 16-20 Marzo 2014, Dallas, Texas (USA)*.
9. "A DFT APPROACH FOR THE INVESTIGATION OF SINGLE-SITE SUPPORTED CATALYSTS", **A. Motta**, M. Delferro, T. Lohr, T.J. Marks *253rd ACS National Meeting & Exposition 2-6 Aprile 2017, S. Francisco (CA, USA)*. **Relatore su invito**.
10. "MODELLING THE PARTIAL REDUCTION OF GRAPHENE OXIDE FOR ADVANCED BIOMEDICAL APPLICATIONS" **Motta A.**, Dalchiele E., Marrani A.G., Palmieri V., Papi M., Zanoni R. *Eurasia Conference on Chemical Sciences, Roma, 5-8 settembre 2018* **Relatore**
11. "THEORETICAL INSIGHTS ON A BIOCOMPATIBLE REDUCTION ROUTE OF GRAPHENE OXIDE BY N-ACETYL CYSTEINE" **A. Motta**, R. Zanoni A.G. Marrani, V. Palmieri, G. Perini, M. De Spirito, M. Papi, E.A. Dalchiele *47esimo congresso nazionale di chimica inorganica, Bari, 9-12 settembre 2019* **Relatore**
12. "THEORETICAL STUDY ON DEGRADATION MECHANISM OF BISPHENOL A POLYCARBONATE UNDER UV IRRADIATION" **A. Motta**, F.P. La Mantia *Workshop materials in the next decade, Favignana (TR) 18-21 settembre 2019* **Relatore**

VID – ATTIVITÀ EDITORIALI E DI REVISORE

- Svolge abituale attività di revisore per le riviste dell'ACS e dell'Elsevier.
- Appartiene all'albo REPRISE (ERC: PE_4) ed eletto come revisore per il PRIN 2015.
- Attualmente è coinvolto come guest associate editor nella realizzazione di un research topic dal titolo " **Functionalization of Silicon Surfaces: Towards Stable Hybrid Interfaces between Semiconductors and Organic Molecules**" per la rivista *Frontiers in Chemistry* (gruppo Frontiers, open access)

VII - ATTIVITÀ SCIENTIFICHE E COLLABORAZIONI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

Le tematiche di ricerca descritte nelle seguenti sezioni seppur non esaustive della produzione scientifica complessiva sono comunque rappresentative degli ambiti e delle metodiche maggiormente approfonditi

- *Processi catalizzati da complessi di metalli di transizione e terre rare*

All'interno di questa tematica il suo contributo ha riguardato l'approfondimento degli aspetti meccanicistici ottenuto attraverso tecniche di chimica computazionale. I processi

catalitici che il modeling ha contribuito a chiarire nei suoi aspetti meccanicistici riguardano svariati ambiti: i processi di polimerizzazione delle olefine, l'idrogenazione degli areni, le reazioni di idroelementazione, la dearomatizzazione e la borilazione delle piridine. In tutti i casi il contributo teorico è stato utilizzato per ottenere profili di reazione, confermare leggi cinetiche, investigare gli effetti elettronici e sterici nell'interazione tra substrati e centri catalitici, prevedere gli effetti isotopici sulla cinetica di reazione. Tutte le tematiche esposte sono state sviluppate all'interno di una collaborazione con il gruppo coordinato dal Prof. Tobin Marks della Northwestern University a partire dal 2004 che ha portato alla pubblicazione di 27 contributi su riviste internazionali

- ***Dinamica molecolare applicata ad interfacce solido/liquido***

L'attività di modeling si è anche sviluppata su un altro campo riguardante lo studio di interfacce solido/liquido e l'interazione di molecole organiche su tali interfacce. La tematica ha riguardato in particolare le interazioni tra le molecole del liquido e i siti superficiali del substrato solido con particolare riferimento all'interfaccia acqua/boemite e come questa interfaccia promuova l'interazione con aminoacidi. Sono state inoltre simulate le proprietà di passivazione delle superfici in presenza di un monostrato di molecole organiche. Questa attività è stata intrapresa durante il periodo di collaborazione con la dottoressa Dominique Costa presso l'ENSC, Paris e con la Prof. Marie-Pierre Gaigeot presso l'Université Evry val d'Essonne all'interno dei progetti europei HPC-Europa2 a cui ha partecipato in qualità di principal investigator. Queste attività hanno portato alla pubblicazione di 4 contributi su riviste internazionali.

- ***Nano ingegnerizzazione di superfici inorganiche con monolayer organici***

La tematica ha riguardato lo sviluppo di metodi sintetici per graftare monolayer organici su superfici inorganiche e la successiva caratterizzazione con tecniche spettroscopiche (XPS e FTIR) e di microscopia (AFM). I risultati di questa attività hanno portato al controllo della densità e dell'orientazione di magneti molecolari ancorati su superfici di silicio per potenziali applicazioni nell'ambito dell'elettronica molecolare. Queste tematiche sono state sviluppate in collaborazione con il gruppo del prof. Dante Gatteschi dell'Università di Firenze e del Prof. Guido Condorelli dell'Università di Catania.

Inoltre, i protocolli sintetici sono stati applicati all'ancoraggio di molecole con proprietà di riconoscimento molecolare nei confronti di agenti organici che mimano i gas nervini e nei confronti della sarcosina (marker usato per il riconoscimento del tumore alla prostata) per applicazioni in ambito biomedico. Queste tematiche sono state affrontate attraverso una collaborazione con il prof. Enrico Dalcanale dell'Università di Parma.

Simili procedure sono state adoperate per il grafting di molecole con proprietà di ottica non lineare. Sempre in questo ambito si è occupato della caratterizzazione meccanicistica di monolayer di porfirine e di agenti polimerizzanti su silicio, come pure di complessi di europio su quarzo e di fosfonati su ossido di zinco. Infine, è stato indagato l'effetto dei monolayer organici sulle proprietà idrofobiche di superfici di ossidi e l'adesione di melamina su substrati metallici. Complessivamente, queste tematiche hanno portato alla pubblicazione di 31 contributi su riviste internazionali.

- ***Riduzione dell'ossido di grafene (GO)***

Recentemente ha contribuito a sviluppare delle tecniche di riduzione elettrochimiche e chimiche del grafene ossido con l'obiettivo di attuare un controllo sulle funzionalità ossigenate e di comprendere il meccanismo di riduzione che interviene durante il processo chimico ed elettrochimico attraverso il modeling molecolare. Inoltre, l'interazione di molecole quali la N-acetil cisteina e l'acido ascorbico con il GO è stata indagata per applicazioni nel campo della biomedicina. Questa tematica è stata portata avanti all'interno di una collaborazione che ha

coinvolto tre enti: il gruppo del prof. Massimiliano Papi della Università Cattolica di Roma, il gruppo del Prof. Robertino Zaroni dell'Università Sapienza di Roma e il prof. Enrique dalchiele dell'istituto de fisica di Montevideo, Uruguay. Questa collaborazione ha portato alla pubblicazione di 4 contributi su riviste internazionali

VIII – RIEPILOGO DEI RISULTATI SCIENTIFICI

È stato primo autore in 15 contributi e corresponding in 4 sul totale di 72 pubblicazioni
Le riviste più prestigiose dove sono comparsi i suoi contributi:

- Nature Catalysis (1 articolo)
- Nature Chemistry (1 articolo)
- Nature Comm. (1 articolo)
- JACS (8 articoli),
- Angew. Chemie Int. Ed. (3 articoli),
- PNAS (2 articoli)

Indici bibliometrici relativi all'intera produzione scientifica dal 2004 al 2021. Dati WoS aggiornati al 8 ottobre 2021

Articoli su riviste internazionali	72
IF totale*	491.782
IF medio per pubblicazione**	7.025
Citazioni totali	2018
Citazioni medie per pubblicazione	28.03
Hirsch (H) index	26
Hirsch (H) index -15***	25

*Dati del Journal of Citation Reports (Clarivate Analytics). I valori di IF di ciascun contributo si riferiscono all'anno di pubblicazione. Per gli articoli del 2021 è stato preso il valore del 2020.

**IF medio è stato calcolato come rapporto tra IF totale e il numero di articoli con un IF (70 pubblicazioni in questo caso)

*** H index degli ultimi 15 anni, cioè a partire dal 2006

Indici bibliometrici relativi alla produzione degli ultimi 10 anni, dal 2011 al 2021. Dati WoS aggiornati al 8 ottobre 2021

Articoli su riviste internazionali	49
IF totale*	383.197
IF medio per pubblicazione**	7.983
Citazioni totali	1183
Citazioni medie per pubblicazione	24.14
Hirsch (H) index	19

*Dati del Journal of Citation Reports (Clarivate Analytics). I valori di IF si riferiscono all'anno di pubblicazione. Per gli articoli del 2021 è stato preso il valore del 2020.

**IF medio è stato calcolato come rapporto tra IF totale e il numero di articoli con un IF (48 in questo caso)

IX A - PUBBLICAZIONI SCELTE AI FINI DELLA SELEZIONE

(citazioni aggiornate al giorno 8/10/2021 prese da WoS)

- [1]. Condorelli, G. G.; Motta, A.; Fragalà, I. L.; Giannazzo, F.; Raineri, V.; Caneschi, A.; Gatteschi, D.: "Anchoring Molecular Magnets on the Si(100) Surface", *Angew. Chemie int. ed.* **2004**, *43*, 4081-4084. **IF(JCR 2004): 9.161. CIT: 92**
- [2]. Motta, A.; Fragalà, I. L.; Marks, T. J. "Links Between Single-Site Heterogeneous and Homogeneous Catalysis. DFT Analysis of Pathways for Organozirconium Catalyst Chemisorptive Activation and Olefin Polymerization on γ -Alumina" *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 16533-16546. **IF(JCR 2008): 8.091. CIT: 49**
- [3]. Motta, A.; Fragalà, I. L.; Marks, T. J. "Proximity and Cooperativity Effects in Binuclear d0 Olefin Polymerization Catalysis. Theoretical Analysis of Structure and Reaction Mechanism" *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 3974-3984. **IF(JCR 2009): 8.580. CIT: 64**
- [4]. Motta, A.; Fragalà, I. L.; Marks, T. J. "Atom-Efficient Carbon-Oxygen Bond Formation Processes. DFT Analysis of the Intramolecular Hydroalkoxylation/Cyclization of Alkynyl Alcohols Mediated by Lanthanide Catalysts" *Organometallics*, **2010**, *29*, 2004-2012. **IF(JCR 2010): 3.888. CIT: 19**
- [5]. Biavardi, E.; Tudisco, C.; Maffei, F.; Motta, A.; Massera, C.; Condorelli, G.G.; Dalcanale, E. "Methylation leads to complexation: Exclusive recognition of sarcosine in water and urine by a cavitand-functionalized silicon surface" *PNAS*, **2012**, *109*, 2263-2268. **IF(JCR 2012): 9.737. CIT: 52**
- [6]. Motta, A.; Gaigeot, M.-P.; Costa, D. "Ab initio Molecular Dynamics Study of the AlOOH boehmite/water interface: Role of steps in interfacial Groththus proton transfers" *J. Phys. Chem. C* **2012**, *116*, 12514-12524. **IF(JCR 2012): 4.814. CIT: 57**
- [7]. Dudnik, A. S.; Weidner, V. L.; Motta, A.; Delferro, M.; Marks, T. J. "Atom-efficient regioselective 1,2-dearomatization of functionalized pyridines by an earth-abundant organolanthanide catalyst" *Nature Chemistry*, **2014**, *6*, 1100-1107. **IF(JCR 2014): 25.325. CIT: 125**
- [8]. Gu, W.; Stalzer, M.M.; Nicholas, C. P.; Bhattacharyya, A.; Motta, A.; Gallagher, J.R.; Zhang, G.; Miller, J.T.; Kobayashi, T.; Pruski, M.; Delferro, M.; Marks, T.J. "Benzene Selectivity In Competitive Arene Hydrogenation: Effects Of Single-Site Catalyst••Acidic Oxide Surface Binding Geometry" *J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, *137* (21), pp 6770–6780. **IF(JCR 2015): 13.038. CIT: 49**
- [9]. Motta, A.; Cannelli, O.; Boccia, A.; Zanoni, R.; Raimondo, M.; Caldarelli, A.; Veronesi, F. "A Mechanistic Explanation of the Peculiar Amphiphobic Properties of Hybrid Organic-Inorganic Coatings by Combining XPS Characterization and DFT Modeling" *ACS Appl. Mater. Inter.* **2015**, *7*, 19941-19947. **IF(JCR 2015): 7.145. CIT: 20**
- [10]. Gao, Y.; Chen, J.; Wang, Y.; Pickens, D. B.; Motta, A.; Wang, Q. J.; Chung, Y.-W.; Lohr, T. L.; Marks T. J. "Highly branched polyethylene oligomers via group IV-catalysed polymerization in very nonpolar media" *Nature Catalysis* **2019**, *2*, 236-242. **IF(JCR 2019): 30.471. CIT: 29**
- [11]. Palmieri, V.; Dalchiele, E. A.; Perini, G.; Motta, A.; De Spirito, M.; Zanoni, R.; Marrani, A. G.; Papi M. "N-acetyl cysteine biocompatibly reduces graphene oxide and persists at the surface as a green radical scavenger", *Chem. Comm.* **2019**, *55*, 4186-4189. **IF(JCR 2019): 5.996. CIT: 12**
- [12]. Dicken, R.D., Motta, A., Marks, T.J. "Homoleptic Lanthanide Amide Catalysts for Organic Synthesis: Experiment and Theory" *ACS Catalysis*, **2021**, *11*, 2715-2734. **IF(JCR 2020): 13.084. CIT: 5**

IX B - ELENCO COMPLETO DELLE PUBBLICAZIONI

(citazioni aggiornate al giorno 8/10/2021 prese da WoS)

- [1]. Condorelli, G. G.; Motta, A.; Fragalà, I. L.; Giannazzo, F.; Raineri, V.; Caneschi, A.; Gatteschi, D.: "Anchoring Molecular Magnets on the Si(100) Surface", *Angew. Chemie int. ed.* **2004**, *43*, 4081-4084. **IF(JCR 2004): 9.161. CIT: 92**
- [2]. Motta, A; Lanza, G.; Fragalà, I. L.; Marks, T. J.: "Energetics and Mechanism of Organolanthanide-Mediated Aminoalkene Hydroamination/Cyclization. A Density Functional Theory Analysis", *Organometallics*, **2004**, *23*, 4097-4104. **IF(JCR 2004): 3.196. CIT: 94**
- [3]. Cerofolini, G.F.; Galati, C.; Giorgi, G.; Motta, A.; Reina, S.; Renna, L.; Terrasi A.: "Nearly flat, terraced, hydrogen terminated, 1x1 (100) silicon prepared by high temperature exposure to H₂", *Appl. Phys. A-Mater* **2005**, *81*, 745-75. **IF(JCR 2005): 1.990. CIT: 11**
- [4]. Motta, A; Fragalà, I. L.; Marks, T. J.: "Energetics and Mechanism of Organolanthanide-Mediated Phosphinoalkene Hydrophosphination/Cyclization. A Density Functional Theory Analysis", *Organometallics*, **2005**, *24*, 4995-5003. **IF(JCR 2005): 3.473. CIT:68**
- [5]. Ustione, A.; Cricenti, A.; Condorelli, G.G.; Motta A.; Di Bella, S. "Bis (salicyladimino) Ni(II) Schiff base complexes, grafted on H-terminated Si(100) surfaces, observed by Scanning Near-field Optical/Atomic Force Microscopy (SNOM/AFM)", *Phys. Stat. Sol. C* **2005**, *12*, 4093-4096. **IF(JCR): n/a. CIT:2**
- [6]. Bedoya, C.; Condorelli, G. G.; Motta, A.; Di Mauro, A.; Anastasi, G.; Fragala, I. L.; Lisoni, J. G.; Wouters, D. "MOCVD of Sr-containing oxides: Transport properties and deposition mechanisms of the Sr(tmhd)₂ pmdeTA precursor" *Chem. Vap. Dep.* **2005**, *11*, 269-275. **IF(JCR 2005): 2.367. CIT:6**
- [7]. Di Bella S.; Condorelli, G.G.; Motta, A.; Ustione, A; Cricenti, A. "Self-Assembled Monolayers of Dipolar Nonlinear Optical Nickel(II) Molecules on the Si(100) Surface with Nanoscale uniformity" *Langmuir* **2006**, *22*, 7952-7955. **IF(JCR 2006): 3.902. CIT: 10**
- [8]. Condorelli, G.G.; Motta, A.; Favazza, M.; Nativo, P.; Fragalà, I.L.; Gatteschi, D. "Density Control of Dodecamanganese Cluster Anchored on Silicon(100)" *Chem. Eur. J.* **2006**, *12*, 3558-3566. **IF(JCR 2006): 5.015. CIT: 24**
- [9]. Motta, A., Fragalà, I.L.; Marks, T.J. "Organolanthanide-Catalyzed Hydroamination/ Cyclization Reactions of Aminoalkynes. Computational Investigation of Mechanism, Lanthanide Identity, and Substituent Effects for a Very Exothermic C-N Bond-Forming Process" *Organometallics* **2006**, *25*, 5533-5539. **IF(JCR 2006): 3.632. CIT: 76**
- [10]. Condorelli, G.G; Motta, A.; Favazza, M.; Fragalà, I.L.; Busi, M.; Menozzi, E.; Dalcanale, E.; Cristofolini, L. "Grafting cavitands on the Si(100) surface" *Langmuir*, **2006**, *22*, 11126-11133. **IF(JCR 2006): 3.902. CIT: 46**
- [11]. Condorelli, G.G.; Motta, A.; Bedoya, C.; Di Mauro, A.; Pellegrino, G.; Smecca, E. "Engineered Si(100) surfaces for the gas-phase anchoring of metal β -diketonate complexes" *Inorg. Chim. Acta* **2007**, *360*, 170-178. **IF(JCR 2007): 1.713. CIT: 17**
- [12]. Motta, A.; Fragalà, I. L.; Marks, T. J. "Stereochemical Control Mechanisms in Propylene Polymerization Mediated by C1-Symmetric CGC Titanium Catalyst Centers." *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 7327-7338. **IF(JCR 2007): 7.885. CIT: 29**
- [13]. Busi, M.; Laurenti, M.; Condorelli, G.G.; Motta, A.; Favazza, M.; Fragalà, I.L.; Montalti, M.; Prodi, L.; Dalcanale, E. "Self-Assembly of Nanosize Coordination Cages on Si(100) Surfaces" *Chem. Eur. J.* **2007**, *13*, 6891-6898. **IF(JCR 2007): 5.330. CIT: 35**
- [14]. Condorelli, G. G.; Motta, A.; Pellegrino, G.; Cornia, A.; Gorini, L.; Fragalà, I. G.; Sangregorio, C.; Sorace, L. "Site-Specific Anchoring of Tetrairon(III) Single Molecule Magnets on Functionalized Si(100) Surfaces" *Chem. Mat.* **2008**, *20*, 2405-2411. **IF(JCR 2008): 5.046. CIT: 37**

- [15]. Motta, A.; Fragalà, I. L.; Marks, T. J. "Links Between Single-Site Heterogeneous and Homogeneous Catalysis. DFT Analysis of Pathways for Organozirconium Catalyst Chemisorptive Activation and Olefin Polymerization on γ -Alumina" *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 16533-16546. **IF(JCR 2008): 8.091. CIT: 49**
- [16]. Pellegrino, G.; Motta, A.; Cornia, A.; Spitaleri, I.; Fragalà, I. L.; Condorelli, G. G. "One Pot Grafting of Tetrairon(III) Single Molecule Magnets on Silicon" *Polyhedron* **2009**, *28*, 1758-1763. **IF(JCR 2009): 2.207. CIT: 12**
- [17]. Motta, A.; Fragalà, I. L.; Marks, T. J. "Proximity and Cooperativity Effects in Binuclear d0 Olefin Polymerization Catalysis. Theoretical Analysis of Structure and Reaction Mechanism" *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 3974-3984. **IF(JCR 2009): 8.580. CIT: 64**
- [18]. Gulino, A.; Lupo, F.; Condorelli, G.G.; Motta, A.; Fragalà, I.L. "Tunable Luminescent Properties of a Europium Complex Monolayer" *J. Mat. Chem.* **2009** *19*, 3507-3511. **IF(JCR 2015): 6.626. CIT: 43**
- [19]. Biavardi, E.; Favazza, M.; Motta, A.; Fragalà, I.L.; Massera, C.; Prodi, L.; Montalti, M.; Melegari, M.; Condorelli, G.G.; Dalcanale E. "molecular recognition on a Cavitand-functionalized Silicon Surface" *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 7447-7455. **IF(JCR 2009): 8.580. CIT: 59**
- [20]. Condorelli, G.G.; Motta, A.; Favazza, M.; Gurrieri, E.; Betti, P.; Dalcanale E. "Molecular recognition of halogen-tagged aromatic VOCs at the air-silicon interface" *Chem. Commun.* **2010**, *46*, 288-290. **IF(JCR 2015): 6.567. CIT: 25**
- [21]. Condorelli, G.G.; Tudisco, C.; Motta, A.; Di Mauro, A.; Lupo, F.; Gulino, A.; Fragalà I.L. "Multistep Anchoring Route of Luminescent (5-Amino-1,10-phenanthroline)-tris (dibenzoylmethane)europium(III) on Si(100)" *Eur. J. Inorg. Chem.* **2010**, 4121-4129. **IF(JCR 2010): 2.910. CIT: 17**
- [22]. Motta, A.; Fragalà, I. L.; Marks, T. J. "Atom-Efficient Carbon-Oxygen Bond Formation Processes. DFT Analysis of the Intramolecular Hydroalkoxylation/Cyclization of Alkynyl Alcohols Mediated by Lanthanide Catalysts" *Organometallics*, **2010**, *29*, 2004-2012. **IF(JCR 2010): 3.888. CIT: 19**
- [23]. Motta, A.; Condorelli, G.G.; Pellegrino, G.; Cornia, A.; Fragalà I.L. "XPS, FTIR-ATR, and AFM Structural Study of Silicon-Grafted Triol Monolayers for Controlled Anchoring of Single Molecule Magnets" *J. Phys. Chem C* **2010** *114*, 20696-20701. **IF(JCR 2010): 4.524. CIT: 3**
- [24]. Tudisco, C.; Trusso Sfrazzetto, G.; Pappalardo, A.; Motta, A.; Tomaselli, G.A.; Fragalà, I.L. Ballistreri, F.P.; Condorelli, G.G. "Covalent functionalization of silicon surfaces with cavitand-modified salen" *Eur. J. Inorg. Chem.* **2011**, 2124-2131. **IF(JCR 2011): 3.049. CIT: 17**
- [25]. Motta, A.; Tudisco, C.; Condorelli, G.G. "Chemical engineering of silicon with functional molecules" (review) *Sci. Adv. Mat.* (review) **2011**, *3*, 362-377. **IF(JCR 2011): 3.308. CIT: 4**
- [26]. Mineo, P.; Motta, A.; Lupo, F.; Renna, L.; Gulino, A. "Si(111) Surface Engineered with Ordered Nanostructures by an Atom Transfer Radical Polymerization" *J. Phys. Chem. C* **2011**, *115*, 12293-12298. **IF(JCR 2011): 4.805. CIT: 14**
- [27]. Tudisco, C.; Betti, P.; Motta, A.; Pinalli, R.; Bombaci, L.; Dalcanale, E.; Condorelli, G.G. "Cavitand-Functionalized Porous Silicon as Active Surface for Organophosphorus Vapors Detection" *Langmuir*, **2012**, *28*, 1782-1789. **IF(JCR 2012): 3.687. CIT: 32**
- [28]. Biavardi, E.; Tudisco, C.; Maffei, F.; Motta, A.; Massera, C.; Condorelli, G.G.; Dalcanale, E. "Methylation leads to complexation: Exclusive recognition of sarcosine in water and urine by a cavitand-functionalized silicon surface" *PNAS*, **2012**, *109*, 2263-2268. **IF(JCR 2012): 9.737. CIT: 52**
- [29]. Motta, A.; Gageot, M.-P.; Costa, D. "Ab initio Molecular Dynamics Study of the AlOOH boehmite/water interface: Role of steps in interfacial Grothaus proton transfers" *J. Phys. Chem. C* **2012**, *116*, 12514-12524. **IF(JCR 2012): 4.814. CIT: 57**
- [30]. Motta, A.; Gageot, M.-P.; Costa, D. "AIMD Evidence of Inner Sphere Adsorption of Glycine on a Stepped (101) Boehmite AlOOH Surface" *J. Phys. Chem. C* **2012**, *116*, 23418-23427. **IF(JCR 2012): 4.814. CIT: 16**

- [31]. Mineo, P.G.; Cristaldi, D.A.; Motta, A.; Gupta, T.; Gulino, A. "Covalent poly(methyl methacrylate) nanostructures on functionalized Si(100) surfaces" *RSC Adv.*, **2013**, *3*, 1137–1144. **IF(JCR 2013): 3.708. CIT: 10**
- [32]. Williams, L.A.; Guo, N.; Motta, A.; Delferro, M.; Fragalà, I.L.; Miller, J.T.; Marks, T.J. "Surface structural-chemical characterization of a single-site d0 heterogeneous arene hydrogenation catalyst having 100% active sites" *PNAS* **2013**, *110*, 413-418. **IF(JCR 2013): 9.809. CIT: 53**
- [33]. Luconi, L.; Rossin, A.; Motta, A.; Tuci, G.; Giambastiani, G. "Group-IV Organometallics Based on Dianionic "Pincer" Ligands: Synthesis, Characterization and Catalytic Activity in Intramolecular Hydroamination Reactions." *Chem. Eur. J.*, **2013**, *19*, 4906-4921 **IF(JCR 2013): 5.696. CIT: 22**
- [34]. Hemeryck, A.; Motta, A.; Costa, D.; Swiatowska, J.; Marcus, P. "Diaminoethane adsorption and water substitution on hydrated TiO₂: a thermochemical study based on first-principles calculations" *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2013**, *15*, 10824 – 10834. **IF(JCR 2013): 4.198. CIT: 11**
- [35]. Liu, S.; Motta, A.; Delferro, M.; Marks, T.J. "Synthesis, Characterization, and Heterobimetallic Cooperation in a Titanium-Chromium Catalyst for Highly Branched Polyethylenes" *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 8830-8833. **IF(JCR 2013): 11.444. CIT: 82**
- [36]. Ribeiro, T.; Motta, A.; Marcus, P.; Gageot, M.-P.; Lopez, X.; Costa, D. "Formation of the O₂H radical at steps of the boehmite surface and its inhibition by gallic acid: an ab initio study" *J. Inorg. Biochem.* **2013**, *128*, 164-173. **IF(JCR 2013): 3.274. CIT: 11**
- [37]. Motta, A.; Fragalà, I.L.; Marks, T.J. "Insight into Group 4 Metallocenium-Mediated Olefin Polymerization Mechanisms using a Metadynamics Approach" *J. Chem. Theory Comput.* **2013**, *9*, 3491-3497. **IF(JCR 2013): 5.310. CIT: 4**
- [38]. Cristaldi, D.A.; Motta, A.; Millesi, S.; Gupta, T.; Chhatwal, M.; Gulino, A. "Long Range Order in Si(100) Surfaces Engineered with Porphyrin Nanostructures" *J. Mat. Chem. C* **2013**, *1*, 4979-4984. **IF(JCR 2014): 4.696. CIT: 11**
- [39]. Gulino, A.; Fragalà, L. I.; Lupo, F.; Malandrino, G.; Motta, A.; Colombo, A.; Dragonetti, C.; Righetto, S.; Roberto, D.; Ugo, R.; Demartin, F.; Ledoux-Rak, I. "Fascinating Role of the number of f Electrons in the Dipolar and Octupolar Contribution to Quadratic Hyperpolarizability of trinuclear lanthanides-copper complexes." *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 7550-7556. **IF(JCR 2013): 4.794. CIT: 10**
- [40]. Smecca, E.; Motta, A.; Fragalà, M.E. Aleeva, Y.; Condorelli, G.G. "Spectroscopic and Theoretical Study of the Grafting Modes of 2 Phosphonic Acids on ZnO Nanorods", *J. Phys Chem. C*, **2013**, *117*, 5364–5372. **IF(JCR 2013): 4.835. CIT: 40**
- [41]. Stephenson, C.J.; McInnis, J.P.; Chen, C.; Weberski, M.P. Jr.; Motta, A.; Delferro, M.; Marks, T.J. "Ni(II) Phenoxyiminato Olefin Polymerization Catalysis: Striking Coordinative Modulation of Hyperbranched Polymer Microstructure and Stability by a Proximate Sulfonyl Group" *ACS Catalysis (letter)*, **2014**, *4*, 999-1003. **IF(JCR 2014): 9.312. CIT: 79**
- [42]. Liu, S.; Motta, A.; Mouat, A.R.; Delferro, M.; Marks, T.J. "Very Large Cooperative Effects in Heterobimetallic Titanium-Chromium Catalysts for Ethylene Polymerization/ Copolymerization" *J. Am. Chem. Soc.* **2014** *136*, 10460-10469. **IF(JCR 2014): 12.113. CIT: 78**
- [43]. Mannini, M.; Bertani, F.; Tudisco, C; Malavolti, L.; Poggini, L.; Misztal, K.; Menozzi, D.; Motta, A.; Otero, E.; Ohresser, O.; Sainctavit, P.; Condorelli, G.G.; Dalcanale, E.; Sessoli, R. "Magnetic behaviour of TbPc₂ single-molecule magnets chemically grafted on silicon surface" *Nature communication*, **2014** doi: 10.1038/ncomms5582. **IF(JCR 2014): 11.470. CIT: 83**
- [44]. Dudnik, A. S.; Weidner, V. L.; Motta, A.; Delferro, M.; Marks, T. J. "Atom-efficient regioselective 1,2-dearomatization of functionalized pyridines by an earth-abundant organolanthanide catalyst" *Nature Chemistry*, **2014**, *6*, 1100-1107. **IF(JCR 2014): 25.325. CIT: 125**
- [45]. Gu, W.; Stalzer, M.M.; Nicholas, C. P.; Bhattacharyya, A.; Motta, A.; Gallagher, J.R.; Zhang, G.; Miller, J.T.; Kobayashi, T.; Pruski, M.; Delferro, M.; Marks, T.J. "Benzene Selectivity In Competitive Arene

- Hydrogenation: Effects Of Single-Site Catalysts•••Acidic Oxide Surface Binding Geometry” *J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, *137* (21), pp 6770–6780. **IF(JCR 2015): 13.038. CIT: 49**
- [46]. Gao, Y.; Mouat, A.R.; Motta, A.; Macchioni, A.; Zuccaccia, C.; Delferro, M.; Marks, T.J. “Pyridyl-Amido Bi-Hafnium Olefin Polymerization Catalysis: Conformationally Supported Hf•••Hf Enchainment Cooperativity” *ACS Catalysis* **2015**, *5*, 5272-5282. **IF(JCR 2015): 9.307. CIT: 27**
- [47]. Motta, A.; Cannelli, O.; Boccia, A.; Zanoni, R.; Raimondo, M.; Caldarelli, A.; Veronesi, F. “A Mechanistic Explanation of the Peculiar Amphiphobic Properties of Hybrid Organic-Inorganic Coatings by Combining XPS Characterization and DFT Modeling” *ACS Appl. Mater. Inter.* **2015**, *7*, 19941-19947. **IF(JCR 2015): 7.145. CIT: 20**
- [48]. Alberga, D.; Mangiardi, G. F.; Motta, A.; Nicolotti, O.; Lattanzi, G. “Effects of Different Self-Assembled Monolayers on Thin-Film Morphology: A Combined DFT/MD Simulation Protocol” *Langmuir* **2015**, *31*, 10693-10701. **IF(JCR 2015): 3.993. CIT: 11**
- [49]. Motta, A.; Szeto, K.C.; Taoufik, M.; Nicholas, C.P. “Energetic pathways and influence of the metallacyclobutane intermediates formed during isobutene / 2-butene cross-metathesis over W-H/Al₂O₃ supported catalyst” *Catal. Sci. Technol.* **2016**, *6*, 3386-3393. **IF(JCR 2016): 5.773. CIT: 5**
- [50]. Stalzer, M.M. ; Nicholas, C.P.; Bhattacharyya, A.; Motta A.; Delferro, M.; Marks, T.J. “Single-Face/Allylic Arene Hydrogenation by a Supported Single-Site d⁰ Organozirconium Catalyst” *Angew. Chemie int. ed.*, **2016**, *55*, 5263-5267. **IF(JCR 2016): 11.994. CIT: 37**
- [51]. Stalzer, M. M. Telser, J.; Krzystek, J.; Motta, A.; Delferro, M.; Marks, T.J. “A Neutrally Charged Trimethylmanganese(III) Complex: Synthesis, Characterization, and Disproportionation Chemistry” *Organometallics*, **2016**, *35*, 2683-2688. **IF(JCR 2016): 3.862. CIT: 4**
- [52]. Raimondo, M.; Veronesi, F.; Boveri, G.; Guarini, G.; Motta, A.; Zanoni, R. “Superhydrophobic properties induced by sol-gel routes on copper surfaces” *Applied surf science* **2017**, *422*, 1022-1029. **IF(JCR 2017): 4.439. CIT: 22**
- [53]. Liu, S.; Invergo, A.M.; McInnis, J.P.; Mouat, A.R.; Motta, A.; Lohr, T.L.; Delferro, M; Marks, T.J. “Distinctive Stereochemically Linked Cooperative Effects in Bimetallic Titanium Olefin Polymerization Catalysts” *Organometallics* **2017**, *36*, 4403-4421. **IF(JCR 2017): 4.051. CIT: 18**
- [54]. Hemeryck, A.; Motta, A.; Lacaze-Dufaure, C.; Costa, D.; Marcus, P. “DFT-D study of adsorption of diaminoethane and propylamine molecules on anatase (101) TiO₂ surface” *Applied surf science.*, **2017**, *426*, 107 – 115. **IF(JCR 2017): 4.439. CIT: 11**
- [55]. Zhang, J., Motta, A., Gao, Y., Stalzer, M.M., Delferro, M., Liu, B., Lohr, T.L., Marks, T.J. “Cationic Pyridylamido Adsorbate on Brønsted Acidic Sulfated Zirconia: A Molecular Supported Organohafnium Catalyst for Olefin Homo- and Co-Polymerization” *ACS Catalysis*, **2018**, *8*, 4893- 4901 **IF(JCR 2018): 12.221. CIT: 14**
- [56]. Tudisco, C. Motta, A.; Barboza, T.; Massera, C.; Giuffrida, A. E.; Pinalli, R.; Dalcanale, E.; Condorelli G.G. “Cavitand-Decorated Silicon Columnar Nanostructures for the Surface Recognition of Volatile Nitroaromatic Compounds” *ACS Omega*, **2018**, *3*, 9172-9181. **IF(JCR 2018): 2.584. CIT: 5**
- [57]. Monforte, F.; Mannino, G.; Alberti, A.; Smecca, E.; Italia, M.; Motta, A.; Tudisco, C.; Condorelli, G. G. “Heterogeneous growth of continuous ZIF-8 films on low-temperature amorphous silicon” *Applied Surf. Science*, **2019**, *473*, 182-189. **IF(JCR 2019): 6.182. CIT: 4**
- [58]. Gao, Y.; Chen, J.; Wang, Y.; Pickens, D. B.; Motta, A.; Wang, Q. J.; Chung, Y.-W.; Lohr, T. L.; Marks T. J. “Highly branched polyethylene oligomers via group IV-catalysed polymerization in very nonpolar media” *Nature Catalysis* **2019**, *2*, 236-242. **IF(JCR 2019): 30.471. CIT: 29**
- [59]. Marrani, A. G. ; Motta, A.; Schrebler, R.; Zanoni, R.; Dalchiele E. A. “Insights from experiment and theory into the electrochemical reduction mechanism of graphene oxide” *Electrochimica Acta*, **2019**, *304*, 231-238. **IF(JCR 2019): 6.215. CIT: 15**

- [60]. Palmieri, V.; Dalchiele, E. A.; Perini, G.; Motta, A.; De Spirito, M.; Zaroni, R.; Marrani, A. G.; Papi M. "biocompatible N-acetyl cysteine reduces graphene oxide and persists at the surface as a green radical scavenger", *Chem. Comm.* **2019**, 55, 4186-4189. **IF(JCR 2019): 5.996. CIT: 12**
- [61]. Chen, J.; Motta, A.; Wang, B.; Gao, Y.; Marks, T.J. "Significant Polar Comonomer Enchainment in Zirconium-Catalyzed, Masking Reagent-Free, Ethylene Copolymerizations" *Angew. Chemie int ed.* **2019**, 58, 7030-7034. **IF(JCR 2019): 12.959. CIT: 16**
- [62]. Chen, J.; Motta, A.; Zhang, J.; Gao, Y.; Marks, T.J. "Mechanism of Organoscandium-Catalyzed Ethylene Copolymerization with Amino-Olefins. A Quantum Chemical Analysis." *ACS Catalysis* **2019**, 9, 8810-8818. **IF(JCR 2019): 12.350. CIT: 9**
- [63]. Marrani A.G.; Coico, A.C.; Giacco, D.; Zaroni, R.; Motta, A.; Schrebler, R.; Dini, D.; Di Girolamo, D.; Dalchiele, E.A. "Flexible Interfaces between Reduced Graphene Oxide and Indium Tin Oxide/Polyethylene Terephthalate for Advanced Optoelectronic Devices" *ACS Appl. Nano Mat.* **2019**, 2, 5963-5972. **IF(JCR 2020): 5.097. CIT: 4**
- [64]. Barger, C.J.; Motta, A.; Weidner, V.L.; Lohr, T.L.; Marks T.J. "La[N(SiMe₃)₂]₃ – Catalyzed Ester Reductions with Pinacolborane. Scope and Mechanism of Ester Cleavage" *ACS Catalysis* **2019**, 9, 9015-9024. **IF(JCR 2019): 12.350. CIT: 25**
- [65]. Monforte, F.; Falsaperna, M.; Pellegrino, A.L.; Bongiorno, C.; Motta, A.; Mannino, G.; Condorelli G.G. Direct growth on Si(100) of isolated octahedral Mil-101(Fe) crystals for the separation of aromatic vapors" *J. Phys. Chem. C* **2019**, 123, 28836-28845. **IF(JCR 2019): 4.189. CIT: 5**
- [66]. C. J. Barger, R. D. Dicken, V. L. Weidner, A. Motta, T. L. Lohr, T.J. Marks "La[N(sime₃)₂]₃-catalyzed deoxygenative reduction of amides with pinacolborane. scope and mechanism" *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, 142, 8019-8028. **IF(JCR 2020): 15.419. CIT: 20**
- [67]. Motta, A., La Mantia, F.P., Ascione, L., Mistretta, M.C. "Theoretical study on the decomposition mechanism of bisphenol A polycarbonate induced by the combined effect of humidity and UV irradiation" *J. Mol. Graph. Model.* **2020** 99, 107622. **IF(JCR 2020): 2.518. CIT: 6**
- [68]. Marrani, A.G.; Motta, A.; Palmieri, V.; Perini, G.; Papi, M.; Dalchiele, E. A.; Schrebler, R.; Zaroni, R. "A comparative experimental and theoretical study of the mechanism of graphene oxide mild reduction by ascorbic acid and N-acetyl cysteine for biomedical applications" *Materials Advances*, **2020**, 1, 2745-2754. **IF(JCR 2020): n/a. CIT: 0**
- [69]. Dicken, R.D., Motta, A., Marks, T.J. "Homoleptic Lanthanide Amide Catalysts for Organic Synthesis: Experiment and Theory" *ACS Catalysis*, **2021**, 11, 2715-2734. **IF(JCR 2020): 13.084. CIT: 5**
- [70]. Zhang, J., Mason, A.H., Motta, A., Cesar, L.G., Kratish, Y., Lohr, T.L., Miller, J.T., Gao, Y., Marks, T.J. "Surface vs homogeneous organo-hafnium catalyst ion-pairing and ligand effects on ethylene homo- And copolymerizations" *ACS Catalysis*, **2021**, 11, 3239-3250. **IF(JCR 2020): 13.084. CIT: 1**
- [71]. Lanzilotto, V., Grazioli, C., Stredansky, M., Zhang, T., Schio, L., Goldoni, A., Floreano, L., Motta, A., Cossaro, A., Puglia, C. "Tailoring surface-supported water-melamine complexes by cooperative H-bonding interactions" *Nanoscale Advances*, **2021**, 3, 2359-2365. **IF(JCR 2020): 4.553. CIT: 0**
- [72]. Zhang, J., Mason, A.H., Wang, Y., Motta, A., Kobayashi, T., Pruski, M., Gao, Y., Marks, T.J. "Beyond the Active Site. Cp*ZrMe₃/Sulfated Alumina-Catalyzed Olefin Polymerization Tacticity via Catalyst-Surface Ion-Pairing" *ChemCatChem* **2021**, 13, 2564-2569. **IF(JCR 2020): 5.686. CIT: 0**

Il sottoscritto presenta questo curriculum firmato come dichiarazione sostitutiva di certificazione ai sensi del DPR 445/2000, ed è consapevole delle sanzioni penali nelle quali incorrerebbe per dichiarazioni mendaci. Tale curriculum è accompagnato da fotocopia di un documento di riconoscimento valido (art. 76 DPR 445/2000) e dalle dichiarazioni di cui all'allegato C.

Roma, 11/10/2021

f.to Alessandro Motta