

Breve CV di Lorenzo Gontrani

Assegnista di ricerca presso i dipartimenti di Ingegneria Industriale, Fisica e Chimica Inorganica all'Università di Roma Tor Vergata, svolge attualmente le sue ricerche nell'ambito della caratterizzazione sperimentale e modellistica di nano particelle di grafene ossidato funzionalizzate con ioni metallici, per sviluppare metodologie analitiche innovative per monitorare l'inquinamento delle acque da metalli pesanti e da arsenico. E' titolare di un corso di esercitazioni di "General Chemistry" nell'ambito del corso di laurea in Farmacia (in lingua inglese) presso il dipartimento omonimo dell'Università di Roma Tor Vergata. Precedentemente, si è occupato attivamente di chimica fisica dei liquidi, principalmente nell'ambito alla modellizzazione delle interazioni tra molecole e/o ioni in liquidi ionici puri e in miscele con solventi molecolari, e ai solventi eutettici basso fondenti (DES). Ha maturato notevole esperienza relativa a misure di tipo diffrattometrico (raggi-X) e spettroscopico presso laboratori universitari e strutture internazionali (Large Scale Facilities – sincrotroni).

Formazione

Laureato in Chimica nel 1998 presso l'Università di Roma "La Sapienza", consegue il Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche nel 2002, presso il gruppo di Chimica Teorica dell'Università di Pisa.

Carriera accademica

Dopo alcuni anni di impiego presso la *start-up* accademico industriale C4T tra Università di Tor Vergata, e industrie farmaceutiche (Tecnofarmaci) dal 2002 al 2006), dove si è dedicato allo sviluppo di metodologie computazionali nel campo del *drug discovery* e della bioinformatica (inibitori delle metallo-proteasi e della DNA-Topoisomerasi I, modulatori dei recettori dei linfociti gamma-delta), trascorre alcuni anni di studio post dottorale presso CASPUR (centro di calcolo interdipartimentale di Roma), Università di Cagliari, Università La Sapienza e CNR-ISM. A Marzo 2013 consegue l'Abilitazione Scientifica Nazionale a Professore Associato nel SSD CHIM/02, confermata per il periodo 2018-2024.

Attività scientifica

Ha partecipato a numerosi programmi di ricerca nazionali ed internazionali nell'ambito dei liquidi ionici e della modellizzazione di sistemi inorganici (perovskiti e nano particelle di grafene), tra cui: Struttura e Dinamica di Liquidi Ionici e loro miscele, Progetto FIRB Structure and dynamics of ionic liquids, a Progetti computazionali Prace TIER-0 (Ab initio molecular dynamics of lanthanides in protic ionic liquids, Amino-acid anions in organic compounds: charting the boundary of room temperature Ionic Liquids, ADRENALINE - hAlDe peROVskites sEqueNtiAL deposItioN mEchanism (by ab initio rare events simulations), PROVING-IL – PeROVskite Interface eNgineerInG with Ionic Liquids, Progetti ISCRA-C 2019 (FOSQUI, Figuring out the spectroscopic properties of graphene QDOTS in water solution: the quenching effect of metal ions) ed ESRF (Sincrotrone Grenoble) "Proton transfer in alkylammonium-based ionic liquids binary mixtures", come responsabile o co-responsabile.

E stato *visiting fellow* presso l'Università Blaise Pascal di Clermont-Ferrand nell'ambito del programma universitario Italo-Francese, e presso i laboratori QUILL di Queen's University of Belfast.

E' autore di 87 pubblicazioni su riviste internazionali, con circa 2040 citazioni e indice H 25 (fonte Scopus); *referee* di riviste internazionali nel settore della strutturistica chimica di sistemi disordinati, dei liquidi ionici/DES e della modellistica computazionale, ed ha supervisionato attività di tesi di laurea triennale (12), magistrale (6), dottorato di ricerca (6) nel periodo 2010-2018. Da febbraio 2018 è membro del comitato editoriale delle riviste *Molecules* e *Symmetry*, in cui è responsabile della pubblicazione dei fascicoli "Molecular Liquids" e "Materials Science and X-Ray Diffraction"