

## INFORMAZIONI PERSONALI

Alessandro Nicola Nardi

ESPERIENZA  
PROFESSIONALE

Novembre 2020 – Attuale

**Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche – XXXVI ciclo**

Dipartimento di Chimica, La Sapienza Università di Roma

Chimica teorica e computazionale. Supervisor: Prof. Marco D'Abramo

Gennaio 2023 – Luglio 2023

**Soggiorno di ricerca**

Facultat de Ciències, Institut de Química Computacional i Catàlisi, Universitat de Girona

Chimica teorica e computazionale. Supervisor: Prof. Lluís Blancafort

Aprile 2022 – Maggio 2022

**Borsa di collaborazione per il Corso di Laurea Triennale in Chimica**

Dipartimento di Chimica, La Sapienza Università di Roma

Assistente presso il laboratorio di Chimica Analitica Qualitativa per gli studenti del primo anno

Ottobre 2021 – Novembre 2021

**Incarico di tutoraggio per OF@ Matematica**

Dipartimento di Scienze Ambientali, La Sapienza Università di Roma

Attività di verifica delle conoscenze e recupero degli obblighi formativi aggiuntivi in Matematica per gli studenti del primo anno

Ottobre 2018 – Maggio 2019

**Borsa di collaborazione per il Corso di Laurea Triennale in Chimica**

Dipartimento di Chimica, La Sapienza Università di Roma

Assistente presso il laboratorio di Analisi Organica per gli studenti del secondo e terzo anno

Marzo 2018 – Giugno 2018

**Borsa di collaborazione per il Corso di Laurea Triennale in Chimica**

Dipartimento di Chimica, La Sapienza Università di Roma

Assistente presso il laboratorio di Chimica Analitica Qualitativa per gli studenti del primo anno

Marzo 2017 – Giugno 2017

**Borsa di collaborazione per il Corso di Laurea Triennale in Chimica**

Dipartimento di Chimica, La Sapienza Università di Roma

Assistente presso il laboratorio di Chimica Analitica Qualitativa per gli studenti del primo anno

## ISTRUZIONE E FORMAZIONE

Ottobre 2018 – Ottobre 2020

**Corso di Laurea Magistrale in Chimica**

Dipartimento di Chimica, La Sapienza Università di Roma

Supervisor: Prof. Marco D'Abramo

Voto finale: 110/110 cum laude

Ottobre 2015 – Luglio 2018

**Corso di Laurea Triennale in Chimica**

Dipartimento di Chimica, La Sapienza Università di Roma

Supervisor: Prof. Domenico Stranges

Voto finale: 110/110 cum laude

## COMPETENZE PERSONALI

Lingua madre italiano

Altre lingue	COMPRESIONE		PARLATO		PRODUZIONE SCRITTA
	Ascolto	Lettura	Interazione	Produzione orale	
inglese	B2	B2	B2	B2	B2
catalano	A2	A2	A1	A1	A1
spagnolo	A1	A1	A1	A1	A1

[Quadro Comune Europeo di Riferimento delle Lingue](#)

**Competenze comunicative** Buone competenze comunicative acquisite durante il percorso accademico (attraverso presentazioni e comunicazioni scritte e orali) ed in particolare durante le esperienze delle collaborazioni di laboratorio (borse di collaborazione) e tutoraggio.

**Competenze organizzative e gestionali** Durante le esperienze di collaborazione di laboratorio e di tutoraggio sono state acquisite buone competenze organizzative e gestionali grazie ai compiti di organizzazione del materiale per gli studenti e divisione dei compiti con gli altri colleghi.

**Competenze professionali**

- Modellizzazione di sistemi molecolari complessi attraverso i metodi della Chimica teorica e computazionale. Software: GROMACS, Gaussian, Molcas, DALTON, QChem, Orca.
- Preparativa di laboratorio. Competenza acquisita durante le attività di collaboratore di laboratorio presso l'Università di Roma La Sapienza.

## Competenze digitali

AUTOVALUTAZIONE				
Elaborazione delle informazioni	Comunicazione	Creazione di Contenuti	IT security	Trouble-shooting
Avanzato	Avanzato	Intermedio	Intermedio	Intermedio

Buona conoscenza di software: MATLAB, Grace, Kaleidagraph, Pacchetti Microsoft Office (Word, Excel, Power Point), LaTeX (TexMaker, Overleaf), VMD, PyMol, ChemDraw, ChemSketch.

Buona conoscenza di linguaggi di programmazione: Python, Fortran 90/95, Bash.

Patente di guida B

## ULTERIORI INFORMAZIONI

**Pubblicazioni** D'Annibale, V., Nardi, A.N., Amadei, A., D'Abramo, M. Theoretical characterization of the reduction potentials of nucleic acids in solution. *Journal of Chemical Theory and Computation* **2021**, 17 (3), 1301-1307. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00728>

Montemiglio, L.C., Gugole, E., Freda, I., Exertier, C., D'Auria, L., Chen, C.G., Nardi, A.N., Cerutti, G., Parisi, G., D'Abramo, M., Savino, C., Vallone, B. Point Mutations at a Key Site Alter the Cytochrome P450 OleP Structural Dynamics. *Biomolecules* **2022**, 12, 55. DOI: <https://doi.org/10.3390/biom12010055>

Chen, C.G., Nardi, A.N., Amadei, A., D'Abramo, M. Theoretical Modeling of Redox Potentials of Biomolecules. *Molecules* **2022**, *27*, 1077. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules27031077>

Chen, C.G., Nardi, A.N., Giustini, M., D'Abramo, M. Absorption behavior of doxorubicin hydrochloride in visible region in different environments: a combined experimental and computational study. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2022**, *24*, 12027. DOI: <https://doi.org/10.1039/D1CP05182B>

Nardi, A.N., Olivieri, A., D'Abramo, M. Rationalizing Sequence and Conformational Effects on the Guanine Oxidation in Different DNA Conformations. *The Journal of Physical Chemistry B* **2022**, *126*, 5017. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c02391>

Gjerde, N.S., Nardi, A.N., Chen, C.G., Di Gianvincenzo, P., D'Abramo, M., Scipioni, A., Galantini, L., Giustini, M. Complexation and organization of doxorubicin on polystyrene sulfonate chains: impacts on doxorubicin dimerization and quenching. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2022**, *24*, 25990. DOI: <https://doi.org/10.1039/D2CP02714C>

Nardi, A.N., D'Abramo, M., Amadei, A. Modeling Charge Transfer Reactions by Hopping between Electronic Ground State Minima: Application to Hole Transfer between DNA Bases. *Molecules* **2022**, *27*, 7408. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules27217408>

Chen, C.G., Nardi, A.N., Amadei, A., D'Abramo, M. PyMM: An Open-Source Python Program for QM/MM Simulations Based on the Perturbed Matrix Method. *Journal of Chemical Theory and Computation* **2023**. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.2c00767>

De Sciscio, M.L., Nardi, A.N., Parisi, G., Bulfaro, G., Costanzo, A., Gugole, E., Exertier C., Freda I., Savino C., Vallone B., Montemiglio L. C., D'Abramo, M. Effect of Salts on the Conformational Dynamics of the Cytochrome P450 OleP. *Molecules* **2023**, *28*(2), 832. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules28020832>

Nardi, A.N., Olivieri, A., Amadei, A., Salvio, R., D'Abramo, M. Modelling Complex Bimolecular Reactions in a Condensed Phase: The Case of Phosphodiester Hydrolysis. *Molecules* **2023**, *28*(5), 2152. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules28052152>

Chotechuang, N., Di Gianvincenzo, P., C., Chen, C.G., Nardi, A.N., Padró, D., Boonla, C., Ortore, M.G., D'Abramo, M., Moya, S.E. A Study of Cyanidin/Alginate Complexation: Influence of pH in Assembly and Chiral Properties. *Carbohydrate Polymers* **2023**, 315 DOI: <http://dx.doi.org/10.2139/ssm.4368201>

De Sciscio, M.L., Nardi, A.N., Centola, F., Rossi, M., Guarnera, E., D'Abramo, M. (2023). Molecular Modeling of the Deamidation Reaction in Solution: A Theoretical–Computational Study. *The Journal of Physical Chemistry B* **2023**. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c04662>

#### Presentazioni

Contributo orale: *Rationalizing Sequence and Conformational Effects on the Guanine Oxidation in Different DNA Conformations*. First Symposium for YouNg Chemists: Innovation and Sustainability, Roma (June 20-23, 2022).

Contributo orale: *Modeling charge transfer reactions by hopping between electronic ground state minima: application to hole transfer between DNA bases*. VII Congresso della divisione di Chimica Teorica e Computazionale, Modena (September 21-23, 2022).

Contributo orale: *Theoretical-computational modelling of the electronic and structural properties of nucleic acids in solution*. Institut de Química Computacional i Catàlisi, Girona (February 8, 2023).