

Curriculum Vitae di ALESSANDRO MOTTA

PERCORSO FORMATIVO

- 1995 **Diplomato** presso il liceo scientifico “G. Galilei” di Catania nel luglio 1995.
- 1995-2001 **Laurea** quinquennale in Chimica presso l’Università di Catania conferita in aprile 2001; Tesi: *Modellizzazione quantomeccanica di sistemi inorganici con proprietà funzionali*.
- 2002-2004 **Dottorato in Scienza dei Materiali (XVII ciclo)**, Titolo di dottore di ricerca ricevuto presso l’Università di Padova nel marzo 2005; Tesi: *Meccanismi di reazione di processi catalitici. Un approccio teorico*.

PERCORSO PROFESSIONALE

- 2001_{Ago}-2001_{Dic} **Collaborazione coordinata e continuativa** post-laurea –presso l’Università di Catania per il progetto: ‘*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: “*Studio di sistemi ibridi organico-inorganici ancorati su superfici di interesse tecnologico*”
- 2005_{Mag}-2007_{Apr} **Assegno di ricerca** – svolto presso l’Università di Catania all’interno del progetto: “*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: “*Sintesi e caratterizzazione di sistemi ibridi organico/inorganici nanostrutturati su substrati di silicio*”
- 2009_{Mag}-2022_{Ott} **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.
- 2022_{Nov}-Ora **Professore Associato** per il raggruppamento disciplinare CHIM/03 (chimica generale ed inorganica) presso il Dipartimento di Chimica dell’Università di Roma “Ls Sapienza”
- 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.

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**. ha collaborato e collabora tuttora con il Prof. Tobin Marks 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 e del progetto FRESCORT dal 2010 al 2012.
- **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 Gaigeot presso i suoi laboratori all'interno del progetto europeo HPC-Europa2.
- **Theoretische Chemie Gruppe Technische Universität Wien - Institut für Materialchemie, Wien.** Nel 2012 ha lavorato presso i laboratori del Prof. Peter Blaha, all'interno di un programma di ricerca finanziato dal CNRS con l'obiettivo di imparare i metodi computazionali di analisi full electron di sistemi periodici.

ESPERIENZE DIDATTICHE

- Titolare dell'insegnamento di Chimica per il corso triennale di fisica presso L'Università di Roma La Sapienza a partire dall'A.A. 2022/2023
- Titolare dell'insegnamento di chimica generale ed inorganica per il corso triennale di scienze biologiche presso L'Università di Roma La Sapienza a partire dall'A.A. 2015/2016
- 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**.

PARTECIPAZIONE A PROGETTI

- Progetti vinti in qualità di principal investigator (PI) consistenti in una quota di ore calcolo (**IS CRA grant**) presso le strutture di calcolo intensivo del CINECA:

2020 Progetto: *Cooperation effects of amino pendant catalysts on the chain transfer polymerization process*

2019 Progetto: *Theoretical Insights on a biocompatible reduction route of graphene oxide by N-acetyl cysteine*

2018 Progetto: *theoretical investigation of hydroboration/reduction of ketones, aldehydes, esters and amides using lanthanide catalysts*

2017 Progetto: *Theoretical investigation of copper corroles: effects of ligand substituents on the electronic structure*

2016 Progetto: *Novel catalysts based on Mn complexes. A theoretical investigation of electronic properties*

2015 Progetto: *Super-amphiphobic monolayers on alumina surface. A theoretical molecular model*

2014 Progetto: *Distinct Cooperative effects of Bimetallic Catalysts for olefin polymerization*

2013 Progetto: *Organometallic complex on surface. Theoretical characterization and catalytic activity*

2012 Progetto: *adhesion properties of functional molecules on metal-oxide surfaces*

- Progetti vinti in qualità di principal investigator (PI) consistenti in una quota di ore calcolo (**HPC-EUROPA2 grant**) presso le strutture di calcolo intensivo del CINES:
2012 Progetto: “*Amine coverage on titanium oxide/solvent interface. A DFT molecular dynamics study*”
2011 Progetto: “*Adsorption at the solid liquid interface revisited with ab initio MD*”
2010 Progetto: “*Glycine adsorption on boehmite surface*”
- Progetti nei quali ha lavorato in qualità di partecipante:
 - **PRIN 2015** 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)

ORGANIZZAZIONE DI EVENTI SCIENTIFICI

1. È stato membro del comitato direttivo e scientifico per l’organizzazione del forum nazionale di scienza dei materiali per giovani ricercatori” organizzato dal consorzio INSTM per le edizioni del 2010 (terza) del 2012 (quarta) e del 2016 (quinta).
2. È stato membro del comitato organizzatore e scientifico del “XI convegno nazionale sulla scienza e la tecnologia dei materiali” organizzato dal consorzio INSTM nel 2017.

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. Le attività di ricerca si sono concretizzate nella produzione di 75 articoli in riviste internazionali accreditate, nella presentazione di 27 contributi in congressi nazionali e internazionali e nella partecipazione alle attività di revisore per le riviste dell’ACS e dell’Elsevier e all’interno dell’albo REPRISE (ERC: PE_4) per il PRIN 2015:

- *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

- ***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 Gageot presso l'Université Evry val d'Essonne all'interno dei progetti europei HPC-Europa2 a cui ha partecipato in qualità di principal investigator.

- ***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.

- ***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 Zanoni dell'Università Sapienza di Roma e il prof. Enrique Dalchiele dell'istituto de fisica di Montevideo, Uruguay.