

Dott. Simone Morpurgo
Curriculum vitae et studiorum
(aggiornato al Dicembre 2019)

- Nato a Roma (RM) nel **1964**.
- Residente in Roma (RM).
- **1983** Maturità classica (54/60, Liceo Classico Statale F. Vivona, RM)
- **1990** Laurea in Chimica (110/110 e lode) presso il Dip. di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Tesi di laurea sperimentale in Chimica Fisica intitolata: "Studio SAXS di soluzioni acquose micellari di taurodesossicolato di sodio"; relatore: Prof. Nicolae Viorel Pavel.
- **1990-1993** Titolare di una borsa di studio di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche (VI ciclo) presso il Dip. di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" ed il Centro di Studio del C.N.R su "Struttura ed Attività Catalitica di Sistemi di Ossidi (S.A.C.S.O.); supervisore: Prof. Piero Porta.
- **1994** Consegue il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche. Tesi di dottorato in chimica inorganica intitolata "Sintesi e caratterizzazione strutturale di sistemi di ossidi misti a base di Cu-Zn-Co-Al-Cr derivanti da precursori di tipo LDH"; supervisori: Prof. Piero Porta, Prof. Mariano Lo Jacono.
- **1994** Titolare di una borsa di studio C.N.R. presso il Centro di Studio del C.N.R su "Struttura ed Attività Catalitica di Sistemi di Ossidi (S.A.C.S.O.); supervisore: Prof. Piero Porta. Esegue lavori di sintesi e caratterizzazione di sistemi di ossidi misti.
- **1995** Titolare di una borsa di studio C.N.R. presso l'Istituto di Chimica dei Materiali (ICMAT) dell'Area della Ricerca del C.N.R. di Montelibretti (RM); supervisore: Dott. Gustavo Tomlinson.
- **1996-1998** Titolare di una borsa di studio post-dottorato presso il Dip. di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza"; supervisore: Prof. Mario Bossa.
- **1999** Vincitore di concorso per un posto di Ricercatore a tempo indeterminato (RTI) presso il Dip. di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".
- **1999-2019** Posizione di Ricercatore a tempo indeterminato (RTI) presso il Dip. di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Ottiene la conferma nel ruolo nell'anno 2002.

Come Ricercatore a tempo indeterminato, svolge a tutt'oggi attività didattica e di ricerca presso il succitato dipartimento.

Attività didattica:

Nel corso della sua carriera presso il Dipartimento di Chimica dell'Università "La Sapienza" il Dott. Morpurgo ha ricoperto, per affidamento, i seguenti insegnamenti:

- **A.A. 1999-2000** Esercitazioni numeriche per il corso di Chimica Generale ed Inorganica per il CL in scienze biologiche. Titolare: Dott. Franco Calascibetta.
- **A.A. 2000-2001** Corso di Strutturistica Chimica per il CL in Chimica.
- **A.A. 2001-2002** Corso di Strutturistica Chimica per il CL in Chimica.
- **A.A. 2002-2003 (1)** Corso di Strutturistica Chimica per il CL in Chimica. **(2)** Corso di Laboratorio di Metodologie Chimiche per il CL in Scienze biologiche.
- **A.A. 2003-2004 (1)** Corso di Strutturistica Chimica per il CL in Chimica. **(2)** Corso di Laboratorio di Metodologie Chimiche per il CL in Scienze biologiche.
- **A.A. 2004-2005** Corso di Strutturistica Chimica per il CL in Chimica.
- **A.A. 2005-2006 (1)** Corso di Strutturistica Chimica per il CL in Chimica. **(2)** Corso di Laboratorio di Metodologie Chimiche per il CL in Scienze biologiche.
- **A.A. 2006-2007** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica.

- **A.A. 2007-2008** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica.
- **A.A. 2008-2009 (1)** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica. **(2)** Corso di Strutturistica Chimica per il CL in Chimica.
- **A.A. 2009-2010** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica.
- **A.A. 2010-2011** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica.
- **A.A. 2011-2012** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica.
- **A.A. 2012-2013 (1)** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica. **(2)** Corso di Chimica Inorganica I per il CL in Chimica Industriale.
- **A.A. 2013-2014 (1)** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica. **(2)** Corso di Chimica Inorganica I per il CL in Chimica Industriale.
- **A.A. 2014-2015 (1)** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica. **(2)** Corso di Chimica Inorganica I per il CL in Chimica Industriale.
- **A.A. 2015-2016 (1)** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica. **(2)** Corso di Chimica Inorganica I per il CL in Chimica Industriale.
- **A.A. 2016-2017 (1)** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica. **(2)** Corso di Chimica Inorganica I per il CL in Chimica Industriale.
- **A.A. 2017-2018 (1)** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica. **(2)** Corso di Chimica Inorganica I per il CL in Chimica Industriale.
- **A.A. 2018-2019 (1)** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica. **(2)** Corso di Chimica Inorganica I per il CL in Chimica Industriale.
- **A.A. 2019-2020 (1)** Corso di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per il CL in Chimica. **(2)** Corso di Chimica Inorganica I per il CL in Chimica Industriale.

Attività di ricerca:

Ha eseguito (1989-90) una tesi di laurea consistente in uno studio di soluzioni acquose micellari di taurodeossicolato di sodio (sale biliare con proprietà di tensioattivo, usato anche come eccipiente per vaccini) mediante la tecnica della diffusione di raggi X a basso angolo (SAXS) che ha permesso di determinare parametri strutturali come la massa, la forma e le dimensioni degli aggregati micellari di tale sale. Successivamente (1990-95) si è dedicato alla sintesi ed alla caratterizzazione strutturale di sistemi di ossidi misti a base di Cu, Zn, Co, Al, Cr e Mn, da impiegare come catalizzatori per la produzione di alcoli a partire da gas di sintesi ($\text{CO} + \text{H}_2$). Nel corso di tali studi ha impiegato varie tecniche sperimentali quali la diffrazione di raggi X su polveri, la spettroscopia di riflettanza nel campo dell'UV-visibile, misure di suscettività magnetica, di area superficiale, di termogravimetria e di riduzione a temperatura programmata (TPR). In un periodo successivo (1996-2004) ha intrapreso una nuova linea di ricerca incentrata sullo studio di sistemi interagenti mediante legame idrogeno e sulle reazioni di trasferimento protonico (proton-transfer, PT) che avvengono all'interno di essi mediante calcoli quantomeccanici, dapprima a livello semiempirico (metodi AM1 e PM3) e successivamente *ab initio* e/o basati sull'approssimazione del funzionale della densità elettronica (DFT). Tali studi hanno messo in luce le proprietà strutturali dei sistemi legati ed hanno stabilito una correlazione tra l'energia dei legami idrogeno e le energie di attivazione delle reazioni di trasferimento protonico che possono avvenire all'interno di tali sistemi. In una fase successiva (dal 2005 ad oggi)

ha intrapreso una linea di ricerca consistente nello studio, mediante calcoli quantomeccanici a livello DFT, della reazione di decomposizione dell'ossido di azoto in azoto ed ossigeno, catalizzata dalla zeolite ZSM-5 scambiata con rame. L'efficacia di tale catalizzatore per la reazione in oggetto è documentata da circa trent'anni ma non è stato sinora pienamente chiarito il relativo meccanismo di reazione e, di conseguenza, il motivo per cui il catalizzatore Cu-ZSM-5 risulti molto più attivo rispetto ad altri, anche di tipo zeolitico. I calcoli quantomeccanici, integrando i risultati delle misure sperimentali, sono in grado di definire la struttura dei potenziali siti attivi del catalizzatore e di suggerire, per ogni possibile sito attivo, i possibili meccanismi di reazione. Per ogni meccanismo di reazione è possibile calcolare la stabilità dei relativi intermedi e le energie di attivazione dei passaggi elementari, arrivando al calcolo della velocità complessiva di reazione. Nel corso delle ricerche sinora intraprese sono stati confrontati i meccanismi che possono avere luogo su siti composti da un singolo ione Cu(I), così come su siti composti da coppie di ioni Cu(I). Sono stati altresì affrontati aspetti inerenti la metodologia di calcolo, allo scopo di ottenere risultati accurati a costi computazionali accettabili. In particolare è stata approfondita la scelta del set di funzioni di base da assegnare agli atomi che costituiscono il sito attivo del catalizzatore così come il substrato della reazione. E' stato altresì investigato il modo di riprodurre in maniera soddisfacente e ad un costo computazionale ragionevole la porzione del reticolo della zeolite posta nelle immediate vicinanze del sito attivo, individuando nel metodo ONIOM il migliore compromesso tra economia del calcolo ed accuratezza dei risultati. E' stato inoltre studiato l'impiego di diversi funzionali in relazione al problema trattato, riscontrando come solo alcuni di essi siano capaci di fornire risultati adeguati e coerenti con i dati sperimentali. Allo stato attuale, sono in corso di indagine diversi potenziali siti attivi della Cu-ZSM-5, con i relativi possibili meccanismi di reazione ed allo stesso tempo è stato iniziato uno studio, anch'esso computazionale, sulla decomposizione dell'ossido e del protossido di azoto sulla cobalto-mordenite, catalizzatore particolarmente attivo per la decomposizione di N_2O . Si ritiene infatti che il confronto dei risultati computazionali ottenuti sui due sistemi, abbinato alla valutazione delle evidenze sperimentali, possa essere utile ad interpretare la reattività di entrambi i catalizzatori. In maniera complementare a tale attività, è stata saltuariamente intrapresa una collaborazione con il gruppo di ricerca del Prof. Zanoni, eseguendo studi computazionali sull'interazione di molecole dotate di particolari proprietà elettroniche con superfici metalliche o di semiconduttori.