

Lorenzo Gontrani si è laureato in Chimica (Università di Roma "La Sapienza", 1998) nel gruppo di strutturistica chimica diffrattometrica guidato dal Prof. Ruggero Caminiti e successivamente ha conseguito il dottorato in Scienze Chimiche presso l'Università di Pisa nel 2002, dove ha lavorato nel gruppo di chimica teorica sotto la supervisione del Prof. Jacopo Tomasi e Benedetta Mennucci. Dopo aver appreso le basi della chimica computazionale durante la sua tesi di laurea, ha potuto approfondire le sue conoscenze durante il dottorato, quando ha avuto la possibilità di esplorare diversi aspetti della descrizione dei sistemi molecolari mediante chimica quantistica, con particolare riguardo alla modellazione degli effetti del solvente su struttura e proprietà molecolari con modelli continui polarizzabili (PCM) [1]. Dopo il dottorato, ha trascorso alcuni anni presso la start-up farmaceutica C4T, dove è stato coinvolto come chimico computazionale in progetti di drug discovery e bioinformatica. Durante quel periodo, ha appreso diversi metodi computazionali spesso utilizzati in chimica farmaceutica e biologica, come simulazioni di dinamica molecolare, progettazione di farmacofori, modellazione per omologia, ricerca di database e similarità e metodi di docking ligando-recettore, che ha applicato alla progettazione di farmaci antitumorali [2]. Ha poi ampliato le sue capacità computazionali presso il centro di supercalcolo CASPUR di Roma, dove ha acquisito conoscenze specifiche nella parallelizzazione / ottimizzazione di codici nonché nello scripting, e ha sviluppato metodi misti di chimica quantistica / dinamica molecolare per la previsione di spettri elettronici di farmaci [3]. Le simulazioni molecolari sono state anche la sua principale attività presso le Università di Cagliari e Roma Sapienza e al CNR-ISM, dove le ha applicate all'interpretazione dei risultati di alcuni studi sperimentali (diffrazione di raggi X e neutroni, nonché spettroscopia IR) da lui eseguiti su liquidi ionici e molecolari allo stato puro o in miscela [4-8]. In questo contesto, ha preso parte a diversi progetti di ricerca nazionali e internazionali (1 FIRB, 1 PRIN, 1 MIUR/MURST, 4 Sapienza Ateneo, 4 PRACE TIER-0, 1 ESRF, 4 CASPUR Standard Grant, 2 IS CRA-C) come investigatore principale o come investigatore. Per quanto riguarda i grant computazionali, ha ricevuto un totale di 420000 ore FTE come PI in progetti TIER-1 nel periodo 2009-2012 e circa 28 milioni di ore nei bandi TIER-0 PRACE (in collaborazione) nel periodo 2013-2020.

È stato visiting fellow alla Blaise Pascal University (Clermont-Ferrand, Francia), dove ha collaborato attivamente alla formulazione di un nuovo campo di forze per le simulazioni di dinamica molecolare di liquidi ionici, e presso i laboratori QUILL (Belfast, UK), dove si è occupato della sintesi e dell'analisi di solventi eutettici bassofondenti di origine naturale (NADES), composti da cloruro di colina e aminoacidi, che sono stati poi studiati con diffrazione di raggi X, spettroscopia IR e Raman e simulazioni di dinamica molecolare [9-10].

Nel 2019 è stato assunto come docente a contratto nel corso di "General and Bio-Inorganic Chemistry" in lingua inglese presso il Dipartimento di Farmacia (Università di Roma Tor Vergata) e ha iniziato a lavorare su progetti di scienze dei materiali. Più specificamente, si è dedicato alla previsione degli spettri di assorbimento e fluorescenza di quantum dots di grafene ossidato in soluzioni acquose contenenti ioni metallici, combinando metodi TDDFT e modelli continui polarizzabili (PCM) per tenere conto degli effetti del solvente. In questi studi si è potuto prevedere con successo l'aumento o lo smorzamento della fluorescenza osservato con diversi cationi metallici, un aspetto molto importante in considerazione del loro utilizzo come sensori. Un approccio simile è stato utilizzato per razionalizzare gli spettri di assorbimento e fluorescenza, così come gli effetti eccitonici, in frammenti di carbonio lineare (Carbyne) funzionalizzati con nanoparticelle d'oro [11] e su coloranti organici per celle solari (DSSC) [12].

Dall'agosto 2020 è ricercatore a tempo determinato (RTDA) dell'Università di Roma "La Sapienza". Nella sua attuale attività di ricerca, oltre alle linee di ricerca DES e grafene, è coinvolto in studi sperimentali e computazionali su nanoparticelle di ZnO, pigmenti di ftalocianina di rame e altri progetti di scienza dei materiali.

È autore di 94 pubblicazioni su riviste peer-reviewed (2258 citazioni Scopus / H-index 26), 2 capitoli di libri, ha curato una monografia dedicata agli aspetti strutturali dei liquidi ionici (Springer) e serve come revisore di diverse riviste nel campo della chimica computazionale, di liquidi ionici / DES e di scienza dei materiali. Ha supervisionato il lavoro di 12 tesi di laurea triennale, 6 tesi di laurea magistrale e 6 tesi di dottorato. È membro

del comitato editoriale delle riviste *Molecules*, *Symmetry* e *Crystals*. Ha conseguito l'abilitazione a professore associato (ASN) per i settori CHIM/07 e FIS/03 (2020-2029) e CHIM/02 (2018-2024).

1. L Gontrani, B Mennucci, J Tomasi, *J. Mol. Struct.: Theochem* 500 (1-3), 113-127 (2000)
2. F Animati, M Berettoni, M Bigioni, M Binaschi, P Felicetti, L Gontrani, C, O. Incani, A. Madami, E. Monteagudo, L. Olivieri, S. Resta, C. Rossi, A. Cipollone *ChemMedChem*: 3 (2), 266-279 (2008)
3. N Sanna, G Chillemi, L Gontrani, A Grandi, G Mancini, S Castelli, A. Grandi, G. Mancini, S. Castelli, G. Zagotto, C. Zazza, V. Barone, A. Desideri, *J. Phys. Chem. B* 113 (16), 5369-5375 (2009)
4. L Gontrani, E Bodo, A Triolo, F Leonelli, P D'Angelo, V Migliorati, R Caminiti, *J. Phys. Chem. B* 116 (43), 13024-13032 (2012)
5. A Mariani, R Caminiti, F Ramondo, G Salvitti, F Mocci, L Gontrani, *J. Phys. Chem. Lett.* 8 (15), 3512-3522 (2017)
6. L Tanzi, F Ramondo, R Caminiti, M Campetella, A Di Luca, L Gontrani, *J. Chem. Phys.* 143, 114506 (2015)
7. A Mariani, R Caminiti, M Campetella, L Gontrani, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 18 (4), 2297-2302 (2017)
8. L Gontrani, *Biophys. Rev.* 10 (3), 873-880 (2018)
9. M Bonomo, L Gontrani, A Capocéfalo, A Sarra, A Nucara, M Carbone, P Postorino, D Dini, *J. Mol. Liq.* 319, 114292 (2020)
10. L Gontrani, NV Plechkova, M Bonomo, *ACS Sust. Chem. Eng.* 7 (14), 12536-12543 (2019)
11. S. Kutrovskaia, A. Osipov, S. Baryshev, A. Zasedatelev, V. Samyshkin, S. Demirchyan, O. Pulci, D. Grassano, L. Gontrani, R. R. Hartmann, M. E. Portnoi, A. Kucherik, P. G. Lagoudakis, A. Kavokin, *Nano Lett.* 20(9), 6502–6509 (2020)
12. M Bonomo, A Carella, F Borbone, L Rosato, D Dini, L Gontrani, *Dyes and Pigments* 175, 108140 (2020)