

# CURRICULUM VITAE DI LORENZO GONTRANI

(dichiarazione emessa ai sensi degli art. n. 46 e 47 del DPR 445/2000)

Roma, 22/02/2021

## INFORMAZIONI PERSONALI

---

Nome	<b>GONTRANI LORENZO</b>
E-mail	<b>lorenzo.gontrani@uniroma1.it</b>
Nazionalità	<b>Italiana</b>
Data di nascita	<b>6 Aprile 1974</b>

## ESPERIENZA PROFESSIONALE

---

### RUOLI RICOPERTI IN AMBITO

#### ACCADEMICO O ALTRI ENTI DI RICERCA

#### AFFINI

Agosto 2020 –	Dipartimento di Chimica, Università di Roma “La Sapienza”	Ricercatore a tempo determinato di tipo A (art. 24 c.3- a L. 240/10), SC 03/B1, SSD CHIM/03 (Chimica Generale ed Inorganica)
Agosto 2019 – Luglio 2020	Dipartimento di Ingegneria Industriale, Università di Roma Tor Vergata	Assegnista di Ricerca L 240/2010 SSD FIS/03-CHIM/03-CHIM/02, argomento della ricerca: “Calcoli ab-initio degli spettri ottici di assorbimento ed emissione in nanostrutture di grafene”
Aprile 2018 - Marzo 2019	Dipartimento di Chimica “G. Ciamician”, Università di Bologna	Assegnista di Ricerca L 240/10 argomento della ricerca: “studio teorico e sperimentale del legame alogeno in campioni liquidi”
Febbraio 2017- Gennaio 2018	Dipartimento di Chimica, Università di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca L 240/10 argomento della ricerca: "Utilizzo del prototipo EDXD per ricerca sui liquidi ionici";
Febbraio 2016 - Gennaio 2017	Dipartimento di Chimica, Università di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca L 240/10, argomento della ricerca: "Utilizzo del prototipo EDXD per ricerca sui liquidi ionici"
Maggio 2014 – Aprile 2015	Dipartimento di Chimica, Università di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca L 240/10 argomento della ricerca "Preparation and structural, dynamical and thermodynamical characterization of ionic liquids obtained from natural sources. Study of the interactions between natural ionic liquids"

Maggio 2011 – Aprile 2014	CNR-Istituto di Struttura della Materia, Roma Tor Vergata	Collaboratore a progetto FIRB RBFR086BOQ “Caratterizzazione e Proprietà strutturali di Sali Liquidi a temperatura ambiente e loro miscele binarie con liquidi molecolari mediante tecniche computazionali ad alta prestazione e sperimentali”
Luglio 2009 - Giugno 2010	Dipartimento di Scienze della Terra, Università di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca, argomento della ricerca “Stabilità termica, processi di ordine/disordine e cinetiche di trasformazione di fase in minerali ed equivalenti di sintesi mediante diffrazione RX su polveri: solfati ed ossidi”
Dicembre 2007 – Marzo 2009	Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, Università di Cagliari	Assegnista di Ricerca, argomento della ricerca "Sviluppo di metodi di validazione delle simulazioni di Dinamica Molecolare"
Giugno 2006 – Novembre 2007	C. A. S. P. U. R. - Centro di Supercalcolo Per Università e Ricerca	Borsista – settore applicazioni

**RUOLI RICOPERTI IN AMBITO DI STRUTTURE DI RICERCA NON ACCADEMICHE\***

Ottobre 2001 – Giugno 2006	Tecnofarmaci S. C. p. A  Colosseum Combinatorial Chemistry Centre for Technology (C4T) – Università di Roma - “Tor Vergata”	Ricercatore B2-CCNL Chimica. Progetto MIUR (MURST) N°Art11 Legge 451/94 presso C4T, “start-up” biotech tra Università di Roma “Tor Vergata” e Tecnofarmaci S. C. p. A. Co-finanziamento nell'ambito del progetto MURST “Individuazione di molecole di interesse farmaceutico con tecniche di drug design e chimica combinatoriale in una nuova struttura organizzativa”
----------------------------	--	---

*\*Durante il periodo trascorso a Tecnofarmaci e C4T, la pubblicazione dei risultati della ricerca non era possibile, a causa di vincoli di riservatezza*

**ISTRUZIONE E FORMAZIONE**

---

Aprile 1998	Laurea in Chimica (Vecchio Ordinamento)  Università di Roma “La Sapienza”	Voto: 110/110 e lode Titolo della tesi: Studio delle interazioni molecola-molecola e molecola-solvente mediante diffrazione a raggi X, spettroscopia infrarossa e calcolo quantomeccanico
Febbraio 2002	Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche – XIV ciclo  Università di Pisa	Titolo della tesi: Studio delle proprietà energetiche e molecolari di sistemi chimici di interesse biologico con metodi teorico-computazionali. Esempi di applicazioni di metodi teorici di vario tipo e sofisticazione allo studio di sistemi biologici di differente complessità

## LINGUE CONOSCIUTE E CONOSCENZE INFORMATICHE

---

MADRELINGUA	ITALIANA
ALTRE LINGUE	
	<b>INGLESE</b> – CERTIFICAZIONE CAMBRIDGE FIRST CERTIFICATE GRADE B (1990)
Capacità di lettura	ECCELLENTE
Capacità di scrittura	ECCELLENTE
Capacità di espressione orale	ECCELLENTE
	<b>SPAGNOLO</b> – CERTIFICAZIONE NIVEL INTERMEDIO “SOBRESALIENTE” (2002)
Capacità di lettura	BUONA
Capacità di scrittura	BUONA
Capacità di espressione orale	BUONA
	<b>FRANCESE</b>
Capacità di lettura	BUONA
Capacità di scrittura	BUONA
Capacità di espressione orale	BUONA

Ottima conoscenza dei sistemi operativi DOS/Windows, UNIX/LINUX, MacOSX e dei comandi di shell ((T)CSH, BASH);

Conoscenza dei seguenti linguaggi di programmazione/scripting:

- FORTRAN (77/90)
- C
- PERL
- JAVASCRIPT

Conoscenza delle metodologie più recenti per la parallelizzazione dei codici (MPI, OPENMP, metodi ibridi)

Ottima conoscenza dei programmi di molecular modeling/grafica molecolare (Hyperchem, Molden, MOE), meccanica/dinamica molecolare (AMBER, GROMACS, MDYNAMIX, DL\_POLY) e calcolo quantomeccanico (Gaussian, GAMESS, Molpro, CP2K, CPMD, ORCA, NWCHEM, Quantum Espresso), e di programmi per analisi Rietveld di spettri di raggi X su polveri (GSAS-II). Ottima conoscenza di HTML, T<sub>E</sub>X, degli applicativi per ufficio (Office) e dei programmi per la gestione di file grafici e la creazione di pagine Web

## COMPETENZE

---

- Elevata interdisciplinarietà, dimostrata da esperienze lavorative maturate in ambiti molto diversi, sia di tipo accademico che industriale
- Spiccata capacità di affrontare problematiche innovative e non direttamente legate alle conoscenze pregresse
- Solida esperienza nel campo della modellistica di struttura e proprietà molecolari, sfruttando pienamente la sinergia tra metodi di calcolo e tecniche sperimentali
- Notevoli capacità di adattamento e relazione personale all'interno dei gruppi di ricerca frequentati nel corso dell'attività scientifica
- Desiderio di apprendere nuove metodologie e di investigare un problema da angolazioni e prospettive diverse
- Ottime capacità divulgative e didattiche, nonché facilità nella scrittura di articoli e nella redazione di progetti di ricerca

## ATTIVITÀ DIDATTICA

---

### CORSI IN LINGUA INGLESE

2020-2021	General and Bio Inorganic Chemistry”, corso unicamente in lingua inglese, totale 24 ore (3 CFU)	Faculty of Pharmacy, Università di Roma “Tor Vergata”,
2019-2020	General and Bio Inorganic Chemistry”, corso unicamente in lingua inglese, totale 24 ore (3 CFU)	Faculty of Pharmacy, Università di Roma “Tor Vergata”,

### ESERCITAZIONI IN LINGUA INGLESE

2020-2021	Esercitazioni del corso “General and Bio Inorganic Chemistry”, unicamente in lingua inglese, totale 20 ore di esercitazioni numeriche	Faculty of Pharmacy, Università di Roma “Tor Vergata”,
2019-2020	Esercitazioni del corso “General and Bio Inorganic Chemistry”, unicamente in lingua inglese, totale 20 ore di esercitazioni numeriche	Faculty of Pharmacy, Università di Roma “Tor Vergata”,

### CORSI IN LINGUA ITALIANA

2020-2021	Chimica Inorganica I 6 CFU – 48 ore	Dipartimento di Chimica, Università di Roma “La Sapienza”
2018-2019	Applicazione dei Metodi Computazionali in Chimica (spettroscopia molecolare) 6 CFU, 48 ore	Offerta formativa del Dottorato in Scienze Chimiche, Università di Roma “La Sapienza”
2002	Lezioni teorico-pratiche frontali di “Computational Chemistry” e metodiche di “automated docking – virtual screening”	Corsi di formazione per il progetto MIUR N°Art11 Legge 451/94

### ESERCITAZIONI IN LINGUA ITALIANA

2011-2015	Cicli di seminari all’interno del corso “Chimica Fisica III” per Chimica Industriale Esercitazioni frontali al computer per gruppi di uno/due studenti 2 CFU per anno	Dipartimento di Chimica, Università di Roma “La Sapienza”
-----------	--	---

## PARTECIPAZIONE A COMMISSIONI DI ESAME

---

2019-2021	General and Bio-Inorganic Chemistry	Faculty of Pharmacy, Università di Roma "Tor Vergata"
	Chimica Inorganica II	Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche, Università di Roma "Tor Vergata"
2020-2021	Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio	Dipartimento di Chimica, Università di Roma "La Sapienza"

## PARTECIPAZIONE A COLLEGI DI DOCENTI

---

2020-2021	Componente del Collegio dei docenti della scuola di dottorato in Scienze Chimiche per il gruppo di Chimica Inorganica, SSD CHIM/03	Dipartimento di Chimica, Università di Roma "La Sapienza"
-----------	---	--

## TUTORAGGIO DI STUDENTI

---

1994-1995	Laboratorio di Esercitazioni di Preparazioni Chimiche I, Università di Roma "La Sapienza", totale 150 ore	Dipartimento di Chimica, Università di Roma "La Sapienza"
2010-2018	Assistente nella supervisione di tesi di laurea triennale (7), magistrale (5), dottorati di ricerca (5)	Dipartimento di Chimica, Università di Roma "La Sapienza"

## PROGETTI DI RICERCA FINANZIATI, COME PRINCIPAL INVESTIGATOR (REFERENTE PRINCIPALE, PI) O COME INVESTIGATOR (PARTECIPANTE, PAR)

---

2019	Figuring out the spectroscopic properties of graphene QDOTS in water solution: the quenching effect of metal ions" – FOSQUI, CINECA ISCRA Project,	12	PI	50000 core-hour
2019	PRACE TIER0 (19th Access call) Progetto: "PROVING-IL – PeROVskite Interface eNginEerInG with Ionic Liquids",	12	Par	4100000 core-hour (~410000 EUR*) (*stima CINECA per macchine TIER-0: 1 core hour = 0,01 EUR)
2018	PRACE TIER0 (17th Access call) Progetto: "ADRENALINE – hAliDe peRovskites sEqueNtiAL depositioN mEchanism (by ab initio rare events simulations).", 7800000 ore calcolo FTE – anno 2019	12	Par	7800000 core-hour (~780000 EUR*)

2018	Sincrotrone ESRF Progetto CH-5455 "Proton transfer in alkylammonium-based ionic liquids binary mixtures"	PI	7 turni
2014	PRACE TIER0 (8th Regular Call). Progetto: Amino-acid anions in organic compounds: charting the boundary of room temperature Ionic Liquids	12 Par	8166667 core-hour (~81600 EUR*)
2013	PRACE TIER0 (6th Regular Call). Progetto: Ab initio molecular dynamics of lanthanides in protic ionic liquids	12 Par	6000000 core-hour (~60000 EUR*)
2013	Progetto Awards "Preparation and structural, dynamical and thermodynamical characterization of ionic liquids obtained from natural sources. Study of the interactions between natural ionic liquids and thermosensitive polymers." C26H13MNEB	12 Par	55000 EUR
2012	Modeling of ionic liquids containing WCA: CASPUR grant std12-011	12 PI	100000 core-hour
2011	Protic Ionic Liquids: CASPUR grant std11-465	12 PI	90000 core-hour
2011-2014	FIRB RBFR086BOQ_001 "Structure and dynamics of ionic liquids"	36 Par	300000 EUR
2011	Progetto Ateneo C26A113ZNZ "Sintesi e caratterizzazione di nuovi liquidi ionici chirali"	12 Par	13000 EUR
2010	Structure and dynamics in Room Temperature Ionic Liquids CASPUR grant std10-181	12 PI	90000 core-hour
2010	Progetto Ateneo C26A10H5T8 "Protic ionic liquids: a structural and spectroscopic study by means of experimental and computational techniques"	12 Par	85000 EUR
2009	Structure and dynamics in Room Temperature Ionic Liquids CASPUR grant std09-320	12 PI	90000 core-hour
2008-2009	PRIN 2009WHPHRH - "Struttura e Dinamica di Liquidi ionici e loro miscele", area 03	24 Par	231000 EUR
2007	Progetto Ateneo C26A07TZZM "Studio delle proprietà e caratterizzazione di molecole organiche mediante diffrazione di raggi x e calcoli teorici"	12 Par	60000 EUR
2002-2006	Progetto MIUR (MURST) "Individuazione di molecole di interesse farmaceutico con tecniche di drug design e chimica combinatoriale in una nuova struttura organizzativa", N°Art11 Legge 451/94 presso C4T, "start-up" biotech tra Università di Roma "Tor Vergata" e Tecnofarmaci S. C. p. A. (2002)	48 Par	

## **ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA PRESSO QUALIFICATI ISTITUTI ITALIANI E STRANIERI**

---

- Giugno 2018      Laboratorio QUILL, Queen's University of Belfast, Belfast (Irlanda del Nord, UK), svolgendo sintesi e caratterizzazioni di proprietà chimiche e fisiche di Deep Eutectic Solvents (DES) basati su acidi carbossilici e polialcoli, come misure di densità e viscosità al variare della temperatura, spettri ATR, Prof. K. Seddon/N. Plechkova
- Dicembre 2009      *Laboratoire de Thermodynamique des Solutions et des Polymères* - Université Blaise Pascal (Aubière-Clermont-Ferrand). Sviluppo di metodiche per costruire campi di forze per simulazioni classiche di liquidi ionici, Prof. Agilio Padua

## **COLLABORAZIONI SCIENTIFICHE NAZIONALI ED INTERNAZIONALI**

---

Prof.ssa Olivia Pulci, Dipartimento di Fisica, Università di Roma "Tor Vergata", nell'ambito della modellizzazione di spettri UV-VIS di assorbimento e luminescenza di Quantum Dots basati su frammenti di grafene;

Dott. Matteo Bonomo, Dipartimento di Chimica, Università di Torino, nell'ambito della caratterizzazione di sistemi Deep Eutectic Solvents e di nanoparticelle di ossidi metallici mediante tecniche elettrochimiche;

Prof. Paolo Postorino, Prof. Alessandro Nucara, Dipartimento di Fisica, Università di Roma "La Sapienza" nell'ambito della modellizzazione di spettri RAMAN e Far Infrared di Deep Eutectic Solvents basati su sostanze naturali (NaDES);

Prof. Fabio Ramondo (Università di Roma "La Sapienza"), nell'ambito della caratterizzazione teorica di interazioni di legame idrogeno in sistemi in fase condensata;

Dott.ssa Francesca Mocchi (Università di Cagliari), nell'ambito della caratterizzazione di sistemi liquidi e solidi mediante spettroscopia NMR e tecniche di simulazione Coarse-Grained;

Dott.ssa Natalia V. Plechkova (QUILL, University of Belfast) riguardo alla caratterizzazione di nuovi liquidi ionici (protici ed aprotici) e delle loro miscele, e di miscele eutettiche bassofondenti (DES);

Prof. Edward W. Castner (Rutgers University - New Jersey (USA)), riguardante la caratterizzazione di sistemi liquidi e solidi mediante spettroscopia PGFSE-NMR e calcoli teorici;

Dott. Alessandro Mariani – Helmholtz Institut Ulm (HIU, Ulm, Germania), nell'ambito della caratterizzazione modellistica (dinamica molecolare) e diffrattometrica (SAXS) di miscele di liquidi ionici e liquidi molecolari, in diverse condizioni sperimentali

## ATTIVITÀ EDITORIALE

---

EDITOR (CURATORE)	The Structure of Ionic Liquids (Springer 2014)
GUEST EDITOR	Special Issue "Materials Science and X-ray Diffraction" - Symmetry (MDPI) 2018-
GUEST EDITOR	Special Issue "Disclosing Deep Eutectic Solvents" - Crystals (MDPI) 2020-
COLLECTION EDITOR	Topical Collection "Molecular Liquids" – Molecules (MDPI) 2018-
REVISORE PER LE RIVISTE INTERNAZIONALI	Journal of Molecular Liquids, Research on Chemical Intermediates, Computational and Structural Biotechnology Journal, Journal of Molecular Structure, Structural Chemistry, Journal of Non-Crystalline Solids, Chemical Physics Letters (Elsevier)  ACS Sustainable Chemistry & Engineering, ACS Energy Letters, Journal of Physical Chemistry B, ACS Central Science, Journal of Physical Chemistry Letters (American Chemical Society),  Journal of Chemical Physics, Journal of Applied Physics, AIP Advances (American Institute of Physics)  Physical Chemistry Chemical Physics, RSC Advances, Dalton transactions, New Journal of Chemistry (Royal Society of Chemistry)  Angewante Chemie International Edition (Gesellschaft Deutscher Chemiker -German Chemical Society, GDCh)  Advanced Science, ChemCatChem, Journal of Raman Spectroscopy (Wiley)  Topics in Current Chemistry, Physica Status Solidi B, Journal of Molecular Modeling (Springer) Applied Sciences (MDPI); Journal of Chemistry (Hindawi)

## SOMMARIO DELL'ATTIVITÀ SCIENTIFICA. GLI INDICI CITAZIONALI SONO BASATI SU DATI SCOPUS AGGIORNATI AL 22 FEBBRAIO 2021

---

Articoli su rivista internazionale	<b>94</b>
Curatela di Libro	<b>1</b>
Capitoli di Libro	<b>2</b>
Totale citazioni	<b>2295</b>
Numero medio di citazioni per articolo	<b>24,4</b>
Indice H (Hirsch)	<b>26</b>
Indice H contemporaneo	<b>16</b>
Numero di articoli come autore corrispondente:	<b>38</b>



Numero di articoli come autore corrispondente (normalizzato al numero di autori corrispondenti): **28,7**

Numero di articoli come ultimo autore **26**

Numero di articoli come primo autore **18**

Numero di articoli come key author complessivamente **54**

Fattore di impatto totale **319**

Totale citazioni (libri): **31**

Scaricamenti di capitoli ISBN 978-3-642-30985-4 (capitolo), 1500 downloads  
ISBN 978-3-319-01698-6 (libro) 31 citazioni, 12000 downloads  
ISBN 978-3-319-01698-6 (capitolo), 1800 downloads;

#### **ULTERIORI INFORMAZIONI**

**IN POSSESSO DI ABILITAZIONE A PROFESSORE DI SECONDA FASCIA NEI SETTORI CONCORSUALI**

**03/B2 (CHIM/07) CON VALIDITÀ 04/11/2020 - 04/11/2029**

**02/B2 (FIS/03) CON VALIDITÀ 11/11/2020 - 11/11/2029**

**03/A2 (CHIM/02) CON VALIDITÀ 31/07/2018 - 31/07/2024**

#### **RIFERIMENTI:**

**SCOPUS AUTHOR ID: 6506613970**

**RESEARCHERID: L-6061-2014**

**ORCID:0000-0001-8212-7029**

ARTICOLI IN RIVISTA

- 1) 2021  
Palumbo O., Paolone A, Campetella M, Ramondo F, Cappelluti, F, **Gontrani L**, New insights into chloromethyl-oxirane and chloromethyl-thiirane in liquid and solid phase from low-temperature infrared spectroscopy and ab initio modelling, *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 247, 119061 DOI: 10.1016/j.saa.2020.119061
- 2) 2021  
Mariani, A., Bonomo, M., Gao, X., Centrella, Nucara, A, Buscaino, R, Barge A, Barbero N, Gontrani, L., Passerini, S. The unseen evidence of Reduced Ionicity: The elephant in (the) room temperature ionic liquids, *Journal of Molecular Liquids*, 324, 115069 DOI: 10.1016/j.molliq.2020.115069
- 3) 2021  
Campetella M., Cappelluti F., Fasolato C., Conte D., Palumbo O., Paolone A. Carbone M, Postorino P., *Gontrani L.*, Physical-chemical studies on putrescine (butane-1,4-diamine) and its solutions: Experimental and computational investigations, *Journal of Molecular Liquids*, 322, 114568 DOI: 10.1016/j.molliq.2020.114568
- 4) 2020  
**Gontrani L**, Tagliatesta P., Agresti A., Pescetelli S., Carbone M., New insights into the structure of glycols and derivatives: A comparative x-ray diffraction, raman and molecular dynamics study of ethane-1,2-diol, 2-methoxyethan-1-ol and 1,2-dimethoxy ethane, *Crystals*, 10, 1011 DOI: 10.3390/cryst10111011
- 5) 2020  
Di Muzio S., Ramondo F., Gontrani L., Ferella F., Nardone M., Benassi P. Choline Hydrogen Dicarboxylate Ionic Liquids by X-ray Scattering, Vibrational Spectroscopy and Molecular Dynamics: H-Fumarate and H-Maleate and Their Conformations, *Molecules*, 25(21) 4990 DOI: 10.3390/molecules25214990
- 6) 2020  
Bonomo M., **Gontrani L**, Capocefalo A, Sarra A, Nucara A, Carbone M, Postorino P, Dini D, A combined electrochemical, infrared and EDXD tool to disclose Deep Eutectic Solvents formation when one precursor is liquid: Glyceline as case study, *Journal of Molecular Liquids*, 319, 114292 DOI: 10.1016/j.molliq.2020.114292
- 7) 2020  
Kutrovskaya S, Osipov A., Baryshev S, Zasedatelev A., Samyshkin V. Demirchyan S., Pulci O., Grassano D., Gontrani L., Hartmann R.R., Portnoi M.E, Kucherik A., Lagoudakis P.G., Kavokin A., Excitonic Fine Structure in Emission of Linear Carbon Chains, *Nano Letters*, 20(9), 6502–6509 DOI: 10.1021/acs.nanolett.0c02244
- 8) 2020  
Bizzarri BM, Fanelli A, Botta L, Sadun C, Gontrani L, Ferella F, Crucianelli M, Saladino R, Dendrimer crown-ether tethered multi-wall carbon nanotubes support methyltrioxorhenium in the selective oxidation of olefins to epoxides, *RSC Advances*, 10 (29) 17185-17194 DOI: 10.1039/D0RA02785E
- 9) 2020  
Bonomo M, Carella A, Borbone F, Rosato L, Dini D, *Gontrani L*, New pyran-based molecules as both n-and p-type sensitizers in semi-transparent Dye Sensitized Solar Cells, *Dyes and Pigments* 175, 108140 DOI: 10.1016/j.dyepig.2019.108140

- 10) 2020  
Zappi D, Sadun C, Gontrani L, Dini D, Antonelli ML, A new electrochemical sensor for extra-virgin olive oils classification, *Food Control*, 109, 106903 DOI: 10.1016/j.foodcont.2019.106903
- 11) 2019  
Campetella M, Cappelluti F, *Gontrani L*, Medium Range Interactions Evidences in Compounds with Aliphatic Lateral Chain: 1-Pentanoic Acid, 1-Pentanol and Pentylammonium Nitrate as Test Cases, *Chemical Physics Letters*, 734, 136738 DOI: 10.1016/j.cplett.2019.136738
- 12) 2019  
*Gontrani L*, Plechkova NV, Bonomo M, In-Depth Physico-Chemical and Structural Investigation of Dicarboxylic Acid/Choline Chloride NaDES: a Spotlight on the Importance of a Rigorous Preparation Procedure, *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 7 (14), 12536-12543. DOI: 10.1021/acssuschemeng.9b02402
- 13) 2019  
Russina O, Triolo A, Simonetti E, Lo Celso F, Appetecchi GB, Gontrani L, Keiderling U, Mesoscopic structural organization in fluorinated pyrrolidinium-based room temperature ionic liquids, *Journal of Molecular Liquids*, 289, 111110, DOI: 10.1016/j.molliq.2019.111110
- 14) 2019  
Ramondo F, **Gontrani L**, Campetella M, Coupled hydroxyl and ether functionalisation in EAN derivatives: the effect of hydrogen bond donor/acceptor groups on the structural heterogeneity studied with X-Ray diffractions and fixed charge/polarizable simulations, *Physical Chemistry Chemical Physics* 21 (21), 11464-11475 DOI: 10.1039/C9CP00571D
- 15) 2019  
Di Girolamo D, Dar MI, Dini D, Gontrani L, Caminiti R, Mattoni A, Grätzel M, Meloni S, Dual Effect of Humidity on Cesium Lead Bromide: Enhancement and Degradation of Perovskite Films, *Journal of Materials Chemistry A* 7 (19), 12292-12302, DOI: 10.1039/C9TA00715F
- 16) 2019  
Lo Celso F, Appetecchi GB, Simonetti E, Zhao M, Castner E, Keiderling U, Gontrani L, Triolo A, Russina O, Microscopic structural and dynamic features in triphilic room temperature ionic liquids, *Frontiers in Chemistry* 7 (285) DOI: 10.3389/fchem.2019.00285
- 17) 2019  
Zappi D, Gabriele S, Gontrani L, Dini D, Sadun C, Marini F, Antonelli ML Biologically friendly room temperature ionic liquids and nanomaterials for the development of innovative enzymatic biosensors: Part II *Talanta* 194, 26-31 DOI: 10.1016/j.talanta.2018.10.001
- 18) 2018  
**Gontrani L**, Bonomo M, Plechkova V. N, Dini D, Caminiti R, Ionic conductivity and X-Ray structure study of an anhydrous and hydrated choline chloride and oxalic acid deep eutectic solvent, *Physical Chemistry Chemical Physics* 20, 30120-30124 DOI: 10.1039/C8CP06728G
- 19) 2018  
**Gontrani L**, Trequattrini F, Palumbo O, Bencivenni L, Paolone A New Experimental Evidences Regarding Conformational Equilibrium in Ammonium– Bis (trifluoromethanesulfonyl) imide Ionic Liquids, *ChemPhysChem*, 19(20), 2776-2781 DOI 10.1002/cphc.201800442

- 20) 2018  
Bonomo M, Sheehan S, Dowling DP, Gontrani L, Dini D, First Evidence of Electrode Reconstruction in Mesoporous NiO After Operation as Photocathode of Dye Sensitized Solar Cells, *ChemistrySelect* 3 (24), 6729-6736 DOI: 10.1002/slct.201800827
- 21) 2018  
Lo Celso F, Triolo A, Gontrani L, Russina O Communication: Anion-specific response of mesoscopic organization in ionic liquids upon pressurization *Journal of chemical physics* 148 (21), 211102 DOI: 10.1063/1.5036588
- 22) 2018  
**Gontrani L**, Choline-amino acid ionic liquids: past and recent achievements about the structure and properties of these really "green" chemicals. *Biophysical Reviews* (2018) 10(3), 873-880 DOI: 10.1007/s12551-018-0420-9
- 23) 2018  
Campetella M, Mariani A, Sadun C, Wu B, Castner Jr E W, **Gontrani L** Structure and dynamics of propylammonium nitrate-acetonitrile mixtures: an intricate multi-scale system probed with experimental and theoretical techniques, *Journal of Chemical Physics* (2018), 148(13) 134507 DOI: 10.1063/1.5021868
- 24) 2018  
Lo Celso F, Yoshida Y, Lombardo R, Jafta C J, Gontrani L, Triolo A, Russina O, Mesoscopic structural organization in fluorinated room temperature ionic liquids *Comptes Rendus Chimie* 21(8) 757-770 DOI: 10.1016/j.crci.2018.02.001
- 25) 2018  
Lo Celso F, Appetecchi G B, Jafta C J, Gontrani L, Canongia Lopes JN, Triolo A, Russina O, Nanoscale organization in the fluorinated room temperature ionic liquid: tetraethyl ammonium (trifluoromethanesulfonyl)(nonafluorobutylsulfonyl)imide. *Journal of Chemical Physics* 148 (19), 193816 DOI: 10.1063/1.5016236
- 26) 2018  
Campetella M, Le Donne A, Daniele M, Leonelli F, Gontrani L, Lupi S, Bodo E Hydrogen Bonding Features in Cholinium-Based Protic Ionic Liquids From Molecular Dynamics Simulations, *Journal of Physical Chemistry B*, 122(9), 2635-2645, 9 DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b12455
- 27) 2017  
Mariani A, Bonomo M, Boning Wu, Centrella B, Dini D, Castner Jr E W, **Gontrani L** Intriguing Transport Dynamics of Ethylammonium Nitrate – Acetonitrile Binary Mixtures Arising from Nano-inhomogeneity, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19, 27212-27220 DOI: 10.1039/C7CP04592A
- 28) 2017  
**Gontrani L**, Leonelli F, Campetella M, An X-Ray and Computational Study of Liquid Pentylammonium Nitrate, *Chemical Physics Letters*, 687, 38-43 DOI: 10.1016/j.cplett.2017.08.068
- 29) 2017  
**Gontrani L**, Scarpellini E, Caminiti R, Campetella M Bio Ionic Liquids and Water Mixtures: a Structural Study, *RSC Advances* 7 (31), 19338-19344 DOI: 10.1039/c6ra28545g
- 30) 2017  
Mariani A, Caminiti R, **Gontrani L** Water and hexane in an ionic liquid: computational evidence of association under high pressure, *Physical Chemistry Chemical Physics* 19 (13), 8661-8666 DOI: 10.1039/C6CP08450H

- 31) 2017  
Campetella M, Montagna M, Gontrani L, Scarpellini E, Bodo E, Unexpected proton mobility in the bulk phase of cholinium-based ionic liquids: new insights from theoretical calculations, *Physical Chemistry Chemical Physics* 19 (19), 11869-11880 DOI: 10.1039/C7CP01050H
- 32) 2017  
Mariani A, Campetella M, Fasolato C, Daniele M, Capitani F, Bencivenni L, Postorino P, Lupi S, Caminiti R, *Gontrani L*, A joint experimental and computational study on Ethylammonium Nitrate-Ethylene Glycol 1:1 mixture. Structural, kinetic, dynamic and spectroscopic properties, *Journal of Molecular Liquids* 226, 2-8, DOI: 10.1016/j.molliq.2016.08.043
- 33) 2017  
Salma U, Plechkova NV, Caminiti R, **Gontrani L**, The Opposite Effect of Water and N-Methyl-2-Pyrrolidone Cosolvents on The Nanostructural Organization of Ethylammoniumbutanoate Ionic Liquid: a Small and Wide Angle X-Ray Scattering and Molecular Dynamics Simulations Study, *Journal of Physical Chemistry B*, 121 (26), 6399–6407 DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b01837
- 34) 2017  
Mariani A, Caminiti R, Ramondo F, Salvitti G, Mocchi F, **Gontrani L**, Inhomogeneity in Ethylammonium Nitrate–Acetonitrile Binary Mixtures: The Highest “Low q Excess” Reported to Date, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 8 (15), 3512–3522 DOI: 10.1021/acs.jpclett.7b01244
- 35) 2017  
**Gontrani L**, Caminiti R, Salma U, Campetella M, A Structural and Theoretical Study of the Alkylammonium Nitrates Forefather: Liquid Methylammonium Nitrate, *Chemical Physics Letters* 684, 304-309 DOI: 10.1016/j.cplett.2017.07.017
- 36) 2017  
Campetella M, Macchiagodena M, Gontrani L, Kirchner B Effect of Alkyl Chain Length in Protic Ionic Liquids: An AIMD Perspective, *Molecular Physics*, 115, 1582-1589 DOI: 10.1080/00268976.2017.1308027
- 37) 2017  
Salma U, Usula M, Caminiti R, **Gontrani L**, Plechkova N V, Seddon K R, X-Ray and Molecular Dynamics Studies of Butylammonium Butanoate-Water Binary Mixtures, *Physical Chemistry Chemical Physics* 19 (3), 1975-1981 DOI: 10.1039/C6CP06860J
- 38) 2016  
Mariani A., Dattani R., Caminiti R., **Gontrani L** Nanoscale Density Fluctuations in Ionic Liquid Binary Mixtures with Nonamphiphilic Compounds: First Experimental Evidence, *Journal of Physical Chemistry B*, 120(40), 10540-10546
- 39) 2016  
Mariani A, Ballirano P, Angiolari F, Caminiti R, *Gontrani L* Does High Pressure Induce Structural Reorganization in Linear Alcohols? A Computational Answer *ChemPhysChem* 17(19), 3023-3029, DOI 10.1002/cphc.201600268 3
- 40) 2016  
Campetella, M, Chillura Martino D.; Scarpellini E, **Gontrani L**, Low-Q peak in X-ray patterns of choline-phenylalanine and -homophenylalanine: A combined effect of chain and stacking, *Chemical Physics Letters*, 660, 99-101 DOI: 10.1016/j.cplett.2016.08.015
- 41) 2016  
Campetella M, Bovi D, Caminiti R, Guidoni L, Bencivenni L, **Gontrani L**, Structural and Vibrational study of 2-MethoxyEthylAmmonium Nitrate (2-OMeEAN): interpretation of experimental results with ab initio molecular dynamics, *Journal of Chemical Physics*, 145 (2) 024507 DOI: 10.1063/1.4956459

- 42) 2016  
Russina O, De Santis S, *Gontrani L*, Micro- and mesoscopic structural features of a bio-based choline amino acid ionic liquid. *RSC Advances* 6, 34737-34743 DOI: 10.1039/C6RA02142E
- 43) 2016  
M. Campetella M, Bencivenni L, Caminiti R, Zazza C, Di Trapani S, Martino A, **Gontrani L**, Structure and Dynamics of Chloromethyl-Oxirane and Chloromethyl-Thiirane in Liquid Phase: A Joint Experimental and Quantum Chemical Study, *Chemical Physics* 473, 24-31 DOI: 10.1016/j.chemphys.2016.03.027
- 44) 2016  
Salma U, Ballirano P, Caminiti R, Pleckova NV, Seddon KR, *Gontrani L*, A new insight into the nanostructure of Alkylammonium alkanoates based ionic liquids in water, *Physical Chemistry Chemical Physics* 18, 11497-11502 DOI: 10.1039/C5CP07953E
- 45) 2016  
Campetella M, Bodo E, Montagna M, De Santis S, *Gontrani L*, Theoretical study of ionic liquids based on the cholinium cation. Ab initio simulations of their condensed phases, *Journal of Chemical Physics* 144, 104504 DOI: 10.1063/1.4943197
- 46) 2016  
Tanzi L, Nardone M, Benassi P, Ramondo F, Caminiti R, **Gontrani L**, Choline salicylate ionic liquid by X-ray scattering, vibrational spectroscopy and molecular dynamics, *Journal of Molecular Liquids*, 218, 39–49 DOI: 10.1016/j.molliq.2016.02.020
- 47) 2016  
Mariani A, Campetella M, Caminiti R, *Gontrani L* Pressure-induced Mesoscopic Disorder in Protic Ionic Liquids: First Computational Study. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18, 2297-2302 DOI: 10.1039/C5CP06800B
- 48) 2015  
Tanzi L, Ramondo F, Caminiti R, Campetella M, **Gontrani L**. Choline-Carboxylate Bio-Ionic Liquids by X-ray Scattering and Molecular Dynamics. *Journal of Chemical Physics*, 143 (11), 114506 DOI: 10.1063/1.4931031
- 49) 2015  
De Santis S, Masci G, Casciotta F, Caminiti R, Scarpellini E, Campetella M, *Gontrani L*. Cholinium-Amino Acid based Ionic Liquids: a new method of synthesis and physico-chemical characterization. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(32), 20687-20698 DOI: 10.1039/C5CP01612F
- 50) 2015  
Taresco V, **Gontrani L**, Crisante F, Francolini I, Martinelli A, D'Ilario L, Bordi F, Piozzi A Self-Assembly of Catecholic Moiety-Containing Cationic Random Acrylic Copolymers, *Journal of Physical Chemistry B*, 119 (26), 8369–8379 DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b05022
- 51) 2015  
Campetella M, De Santis S, Caminiti R, Ballirano, Sadun C, Tanzi L, *Gontrani L*, Is MRO Pre-peak Possible in Ionic Liquids without an Aliphatic Chain? *RSC Advances*, 5, 50938-50941 DOI: 10.1039/C5RA07567J
- 52) 2015  
Campetella M, Gontrani L, Bodo E, Martino A, D'Apuzzo F, Lupi S, Caminiti R. Interaction and dynamics of ionic liquids based on Choline and amino-acids anions, *Journal of Chemical Physics* 142(23):234502 DOI: 10.1063/1.4922442

- 53) 2015  
Capitani F, Fasolato C, Mangialardo S, Signorelli S, Gontrani L, Postorino P Heterogeneity of propyl-ammonium nitrate solid phases obtained under high pressure, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 84, 13–16. DOI: 10.1016/j.jpcs.2014.12.006
- 54) 2015  
Campetella M, **Gontrani L**, Leonelli F, Bencivenni L, Caminiti R, Two Different Models to Predict Ionic Liquid Diffraction Patterns: Fixed Charge versus Polarizable Potentials, *ChemPhysChem* 16 (1), 197-203 DOI: 10.1002/cphc.201402577
- 55) 2014  
Usula M, Porcedda S, Mocci F, Gontrani L, Caminiti R, Cesare Marincola F, NMR, Calorimetry, and Computational Studies of Aqueous Solutions of N-Methyl-2-pyrrolidone, *Journal of Physical Chemistry B* 118 (35) 10493-10502 DOI: 10.1021/jp505286z
- 56) 2014  
Bodo E, Mangialardo S, Capitani F, Gontrani L, Leonelli F, Postorino P, Interaction of a long alkyl chain protic ionic liquid and water, *Journal of Chemical Physics* 140 (20), 204503 DOI: 10.1063/1.4876036
- 57) 2014  
Usula M, Mocci F., Cesare Marincola F., Porcedda S., **Gontrani L.**, Caminiti R.  
The Structural Organization of N-Methyl-2-pyrrolidone + Water Mixtures: A Densitometry, X-ray Diffraction and Molecular Dynamics Study, *Journal of Chemical Physics* 140 (12) 124503 DOI: 10.1063/1.4869235
- 58) 2014  
Carbone M, **Gontrani L**, Higher fullerenes: Compositional analysis by EDXD and molecular dynamics, *AIP Conference Proceedings* 1603, 40-46 DOI: 10.1063/1.4883040
- 59) 2014  
Carbone M, **Gontrani L**, Brominated carbon black: An EDXD study  
*AIP Conference Proceedings* 1603, 47-52 DOI: 10.1063/1.4883041
- 60) 2014  
Benedetto A, Bodo E, **Gontrani L**, Ballone P, Caminiti R.  
Amino-Acid Anions in Organic Ionic Compounds. An ab initio Study of Selected Ion Pairs, *Journal of Physical Chemistry B*, 118 (9), 2471-2486 DOI: 10.1021/jp412281n
- 61) 2014  
**Gontrani L.**, Nunziante Cesaro S., Stranges S., Bencivenni L., Pieretti A.  
FTIR spectra and density functional theory P.E.D. assignments of oxiranes in Ar matrix at 12 K, *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 120, 558 - 567 DOI: 10.1016/j.saa.2013.12.005
- 62) 2014  
Usula M, Matteoli E, Leonelli F, Mocci F, Cesare Marincola F, Gontrani L, Porcedda S. Thermo-physical properties of ammonium-based ionic liquid + N-methyl-2-pyrrolidone mixtures at 298.15 K, *Fluid Phase Equilibria*, 383, 49–54 DOI: 10.1016/j.fluid.2014.09.031

- 63) 2013  
Migliorati V, Ballirano P, Gontrani L, Materazzi S, Ceccacci F, Caminiti R.  
A combined theoretical and experimental study of solid octyl and decylammonium chlorides and of their aqueous solutions. *Journal of Physical Chemistry B* 117 (25) 7806 - 7818 DOI: 10.1021/jp403103w
- 64) 2013  
Bellagamba M, Bencivenni L, **Gontrani L**, Guidoni L, Sadun C. Tautomerism in liquid 1,2,3-triazole: a combined energy-dispersive X-ray diffraction, molecular dynamics, and FTIR study. *Structural Chemistry*, 24, 933–943 DOI: 10.1007/s11224-013-0206-4
- 65) 2013  
Campetella M, **Gontrani L**, Bodo E, Ceccacci F, Cesare Marincola F, Caminiti R. Conformational Isomerisms and Nano-Aggregation in Substituted Alkylammonium Nitrates Ionic Liquids: an X-ray and Computational Study of 2-OMeEAN. *Journal of Chemical Physics*, 138, 184506, DOI: 10.1063/1.4803799
- 66) 2012  
Russina O, Triolo A, Gontrani L, Caminiti R Mesoscopic structural heterogeneities in Room-Temperature Ionic Liquids. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 3, 27-33, DOI: 10.1021/jz201349z2012
- 67) 2012  
Migliorati V, Ballirano P, Gontrani L, Caminiti R. Crystal Polymorphism of Hexylammonium Chloride and Structural Properties of Its Mixtures with Water. *Journal of Physical Chemistry B*, 116, 2104-2113, DOI: 10.1021/jp2120466
- 68) 2012  
**Gontrani L**, Caminiti R. The structure of liquid N-methyl pyrrolidone probed by x-ray scattering and molecular simulations. *Journal of Chemical Physics*, 136, 074505 DOI: 10.1063/1.3684988
- 69) 2012  
**Gontrani L**, Bodo E, Triolo A, Leonelli F, D'Angelo P, Migliorati V, Caminiti R The Interpretation of Diffraction Patterns of Two Prototypical Protic Ionic Liquids: a Challenging Task for Classical Molecular Dynamics Simulations. *Journal of Physical Chemistry B*, 116, 13024-13032, DOI: 10.1021/jp306110g
- 70) 2012  
Macchiagodena M, Ramondo F, Triolo A, **Gontrani L**, Caminiti R Liquid Structure of 1-Ethyl-3-Methylimidazolium Alkylsulfates by X-ray Scattering and Molecular Dynamics. *Journal of Physical Chemistry B*, 116, 13448 -13458, DOI: 10.1021/jp306982e
- 71) 2012  
Mangialardo S, Gontrani L, Leonelli F, Caminiti R, Postorino P. Role of ionic liquids in protein refolding: native/fibrillar versus treated lysozyme. *RSC Advances*, 2 12329-12336, DOI: 10.1039/C2RA21593D
- 72) 2012  
Cesare Marincola F, Piras C, Russina O, Gontrani L, Saba G, Lai A. NMR Investigation of Imidazolium-Based Ionic Liquids and Their Aqueous Mixtures. *ChemPhysChem*, 13, 1339-1346, DOI: 10.1002/cphc.201100810
- 73) 2011  
Macchiagodena M, Gontrani L, Ramondo F, Triolo A, Caminiti R. Liquid structure of 1-alkyl-3-methylimidazolium-hexafluorophosphates by wide angle x-ray and neutron scattering and molecular dynamics. *Journal of Chemical Physics*, 134, 114521 DOI: 10.1063/1.3565458
- 74) 2011  
Migliorati V, Ballirano P, Gontrani L, Triolo A, Caminiti R. Thermal and Structural Properties of Ethylammonium Chloride and Its Mixture with Water. *Journal of Physical Chemistry B*, 115, 4887-4899, DOI: 10.1021/jp2010138



- 75) 2011  
Donzello M, De Mori G, Viola E, Ercolani C, Bodo E, Mannina L, Capitani D, Rizzoli C, Gontrani L, Aquilanti G, Kadish KM, D'Angelo P. Structural Flexibility and Role of Vicinal 2-Thienyl Rings in 2,3-Dicyano-5,6-di(2-thienyl)-1,4-pyrazine, [(CN)<sub>2</sub>Th<sub>2</sub>Pyz], its Palladium(II) Complex [(CN)<sub>2</sub>Th<sub>2</sub>Pyz(PdCl<sub>2</sub>)<sub>2</sub>] and the Related Pentametallic Pyrazinoporphyrazines [(PdCl<sub>2</sub>)<sub>4</sub>Th<sub>8</sub>TPyzPz<sub>M</sub>] (M = MgII(H<sub>2</sub>O), ZnII). *Inorganic Chemistry*, 50, 12116-12125, DOI: 10.1021/ic201678p
- 76) 2011  
Migliorati V, Ballirano P, Gontrani L, Russina O, Caminiti R. Crystal Polymorphism of Propylammonium Chloride and Structural Properties of Its Mixture with Water. *Journal of Physical Chemistry B*, 115, 11805-11815, DOI: 10.1021/jp206831d
- 77) 2010  
Bodo E, Gontrani L, Caminiti R., Plechkova NV, Seddon KR, Triolo A. Structural Properties of 1-Alkyl-3-methylimidazolium Bis{(trifluoromethyl)sulfonyl}amide Ionic Liquids: X-ray Diffraction Data and Molecular Dynamics Simulations. *Journal of Physical Chemistry B*, 114, 16398-16407, DOI: 10.1021/jp1093299
- 78) 2010  
Bodo E, Gontrani L, Triolo A, Caminiti R. Structural Determination of Ionic Liquids with Theoretical Methods: C<sub>8</sub>mimBr and C<sub>8</sub>mimCl. Strength and Weakness of Current Force Fields. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 1, 1095-1100, DOI: 10.1021/jz100146r
- 79) 2010  
Russina O, Gontrani L, Fazio B, Lombardo D, Triolo A, Caminiti R. Selected chemical-physical properties and structural heterogeneities in 1-ethyl-3-methylimidazolium alkyl-sulfate room temperature ionic liquids. *Chemical Physics Letters*, 493(4-6), 259-262, DOI: 10.1016/j.cplett.2010.05.042
- 80) 2009  
Ramondo F, Tanzi L, Campetella M, Gontrani L, Mancini G, Pieretti A, Sadun C. Hydration of diazoles in water solution: pyrazole. A theoretical and X-ray diffraction study. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 11, 9431-9439, DOI: 10.1039/b909388e
- 81) 2009  
Guidoni L, Gontrani L, Bencivenni L, Sadun C, Ballirano P. Overcoming the Inadequacy of X-ray Powder Diffraction in Reliable Hydrogen Location with the Aid of First Principles Calculations: Crystal Structure Determination of Orotaldehyde Monohydrate. *Journal of Physical Chemistry A*, 113, 353-359, DOI: 10.1021/jp809076t
- 82) 2009  
Russina O, Triolo A, Gontrani L, Caminiti R, Xiao D, Hines LG, Bartsch RA, Quitevis EL, Plechkova N, Seddon KR. Morphology and intermolecular dynamics of 1-alkyl-3-methylimidazolium bis{(trifluoromethane)sulfonyl}amide ionic liquids: structural and dynamic evidence of nanoscale segregation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21, 424121 DOI: 10.1088/0953-8984/21/42/424121
- 83) 2009  
Sanna N, Chillemi G, Gontrani L, Grandi A, Mancini G, Castelli S, Zagotto S, Zazza, C, Barone V, Desideri A. UV-vis spectra of the anticancer camptothecin family drugs in aqueous solution: specific spectroscopic signatures unraveled by a combined computational and experimental study. *Journal of Physical Chemistry B*, 113, 5369-5375, DOI: 10.1021/jp809801y
- 84) 2009  
Gontrani L, Russina O, Lo Celso F, R. Caminiti, Annat G, Triolo A. Liquid Structure of Trihexyltetradecylphosphonium Chloride at Ambient Temperature: An X-ray Scattering and Simulation Study. *Journal of Physical Chemistry B*, 113, 9235-9240, DOI: 10.1021/jp808333a

- 85) 2009  
**Gontrani L**, Russina O, Cesare Marincola F, Caminiti R. An energy dispersive X-ray scattering and molecular dynamics study of liquid dimethyl carbonate. *Journal of Chemical Physics*, 131, 244503, DOI: 10.1063/1.3273847
- 86) 2008  
**Gontrani L**, Ramondo F, Caracciolo G, Caminiti R. A study of cyclohexane, piperidine and morpholine with X-ray diffraction and molecular simulations. *Journal of Molecular Liquids*, 139, 23-28, DOI: 10.1016/j.molliq.2007.10.006
- 87) 2008  
Animati F, Berettoni M, Bigioni M, Binaschi M, Felicetti P, Gontrani L, Incani O, Madami A, Monteagudo E, Olivieri L, Resta S, Rossi C, Cipollone A. Synthesis, biological evaluation, and molecular modeling studies of rebeccamycin analogues modified in the carbohydrate moiety. *ChemMedChem*, 3, 266-279, DOI: 10.1002/cmdc.200700232
- 88) 2008  
Alcaro S, Gontrani L, Incani O, Ortuso F. Computational methods applied to the discovery of stem cell factor ligands. *Theoretical Chemistry Accounts*, 120, 523-531, DOI: 10.1007/s00214-008-0431-x
- 89) 2007  
Ramondo F, Bencivenni L, Caminiti R, Pieretti A, *Gontrani L*. Dimerisation of urea in water solution: a quantum mechanical investigation. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 9, 2206-2215, DOI: 10.1039/b617837e
- 90) 2006  
**Gontrani L** Ramondo F, Caminiti R. Energy dispersive X-ray diffraction and molecular dynamics meet: The structure of liquid pyrrole. *Chemical Physics Letters*, 417, 200-205, DOI: 10.1016/j.cplett.2005.10.021
- 91) 2006  
**Gontrani L**, Ramondo F, Caminiti R., Furan and thiophene in liquid phase: An X-ray and molecular dynamics study. *Chemical Physics Letters*, 422, 256-261, DOI: 10.1016/j.cplett.2006.02.069
- 92) 2001  
Ramondo F, Pieretti A, Gontrani L, Bencivenni L., Hydrogen bonding in barbituric and 2-thiobarbituric acids: a theoretical and FT-IR study. *Chemical Physics*, 271, 293-308, DOI: 10.1016/S0301-0104(01)00440-2
- 93) 2000  
*Gontrani L*, Mennucci B, Tomasi J., Glycine and alanine: a theoretical study of solvent effects upon energetics and molecular response properties. *Journal of Molecular Structure. THEOCHEM*, 500, 113-127, DOI: 10.1016/S0166-1280(00)00390-0
- 94) 1999  
*Gontrani L*, Caminiti R., L. Bencivenni, Sadun C. Molecular aggregation phenomena in solution: An energy dispersive X-ray diffraction study of imidazole concentrated water solutions. *Chemical Physics Letters*, 301, 1-2, 131-137, DOI: 10.1016/S0009-2614(99)00005-6

## CAPITOLI DI LIBRO / CURATELE

95) 2013

Gontrani L, Caminiti R, Saladino M L, Caponetti E, Chillura Martino D. Energy Dispersive X-Ray Diffraction in Cultural Heritage Science: the Winning Duo of structural and Elemental Analysis. In: Conservation Science – Springer Verlag  
DOI: 10.1007/978-3-642-30985-4\_4

96) 2014

X-Ray Diffraction Studies of Ionic Liquids: From Spectra to Structure and Back

**Gontrani L**, Ballirano P, Leonelli F, Caminiti R. in

The Structure of Ionic Liquids, 1-37 Springer International Publishing doi: 10.1007/978-3-319-01698-6

97) 2014 Curatela (Editor)

Caminiti R, **Gontrani L** (a cura di). The Structure of Ionic Liquids. Gontrani L, Ballirano P, Leonelli F, Caminiti R, Russina O, Fazio B, Di Marco G, Triolo A, Mangialardo S, Baldassarre L, Bodo E, Postorino P, Mocci F, Laaksonen A, Wang Y-L, Saba G, Lai A, Cesare Marincola F, Migliorati V, Zitolo A, D'Angelo P, Porcedda S, Usula M, Marongiu B. Soft and Biological Matter, Springer International Publishing, DOI: 10.1007/978-3-319-01698-6

## CONTRIBUTO IN ATTI DI CONVEGNO (IN NERETTO SE PRESENTATORE DEL CONTRIBUTO)

---

98) 2019 – Relazione orale

Proposito P, Pulci O, Pizzoferrato R, Buonocore F, Limosani F, Carbone M, **Gontrani L**, Interaction of Graphene quantum dots with metal ions in solution: an experimental and computational assessment of the optical properties, XLVII Congresso della divisione della società chimica italiana, Roma. 1-4 luglio 2019

99) 2019 – Relazione orale

Bonomo M, Gontrani L, Plechkova NV, Bencivenni L, Caminiti R, Dini D, In-depth physicochemical and structural investigation of Choline Chloride-based Deep Eutectic Solvents (DESs): a spotlight on the importance of a rigorous synthetic procedure, XLVII Congresso della divisione della società chimica italiana, Roma. 1-4 luglio 2019

100) 2018 – Relazione orale

**Gontrani L**, Bonomo M, Dini D, Caminiti R, Carboxylic acid DES: thermodynamical and structural characterization, XLVI Congresso della divisione della società chimica italiana, Bologna. 25-28 giugno 2018

101) 2017 – Poster

**Gontrani L.**, Salma U, Caminiti R, To swell or to shrink? Alkylammonium alcanoates plus molecular solvents. XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Paestum, 10-14 Settembre 2017

102) 2017 – Relazione orale

Mariani A, Caminiti R, Gontrani L, A spotlight on the complex hierarchical structure of some ionic liquid- molecular liquid binary mixtures, XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Paestum, 10-14 settembre 2017

103) 2017 – Relazione orale su invito

Di Girolamo D, **Gontrani L**, Sistema per la diffrazione da raggi-X (XRD), convegno “I primi 5 anni del Laboratorio di Nanotecnologie e Nanoscienze del CNIS”, Centro di ricerca CNIS, Università di Roma La Sapienza, 5 aprile 2017

104) 2016 – Relazione orale

**Gontrani L**, Portalone G, Competella M, Sadun C, Caminiti R, X-Ray Diffraction and Molecular Dynamics Reveal Halogen Bond in Liquid Acetonitriles, ISXB2, 2nd International Symposium on Halogen Bonding, Göteborg (Svezia), 6-10 giugno 2016

105) 2015 – Relazione Orale

Bencivenni L, Bodo E, Bovi D, Competella M, Guidoni L, **Gontrani L**, Masci G, Lupi S, Ramondo F, Tanzi L Prediction of Infrared Spectra of Ionic Liquids with ab initio Molecular Dynamics, III Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, CNR (Roma) 14-16 dicembre 2015

106) 2015 – Poster

Portalone G, Gontrani L, Salma U, Sadun C, Caminiti R “Halogen Bond” in Liquid Acetonitriles: the First X-Ray Diffraction and Molecular Dynamics Study, III Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, CNR (Roma) 14-16 dicembre 2015,

107) 2015 – Relazione Orale

**Gontrani L**, Competella M, Bodo E, Caminiti R. Biocompatible Ionic Liquids: quantum and classical simulation of static and dynamic properties THEOBIO2015, Cagliari, 8-12 giugno 2015,

- 108) 2014 – Relazione Orale  
**Contrani L**, Campetella M, Bodo E, Caminiti R. Prepeak in Protic Ionic Liquids: Do classical and QM Simulations reproduce this Medium-Range Order Phenomenon? In Winter Modelling 2014, Modena, 13-14 marzo 2014
- 109) 2013 - Poster  
**Contrani L**, Sferrazza A, Triolo A, Caminiti R. Short and medium-range Order in L-Proline Esters Ionic Liquids: A X-Ray and MD Study. In: BookADD2013 - Book of Abstracts. vol. P03, ILL-Grenoble (FR), 18-22 marzo 2013
- 110) 2011 - Relazione Orale  
Russina O, Contrani L, Triolo A, Caminiti R. Short/Medium-to-Long Range Order correlations in Room Temperature Ionic Liquids. In: Analysis of diffraction data in real space. Grenoble (France), 11-14 ottobre 2011
- 111) 2011 - Relazione Orale  
Russina O, Contrani L, Lo Celso F, Caminiti R, Triolo A. Morphology of Poly(Ethylene Oxide)-RTILs Mixtures: Sxrs and MD Studies. In: 4-th Conference on Ionic liquids. Washington, 15-18 giugno 2011
- 112) 2011 - Relazione Orale  
Triolo A, Russina O, Contrani L, Caminiti R. Experimental and Computational investigation of room temperature ionic liquids and their binary mixtures. In: I Workshop su Fisica della Materia e Scienza dei Materiali Computazionali al DMD. Roma, 21-22 Febbraio 2011
- 113) 2011 - Relazione Orale  
Russina O, Contrani L, Triolo A, Caminiti R. On the nature of nm-scale heterogeneities in ionic liquids. In: 110° Congresso Società Chimica Fisica Tedesca. Berlino, 2-4 giugno 2011
- 114) 2010 - Relazione Orale  
Migliorati V, Contrani L, Caminiti R. A Combined Molecular Dynamics AND X-Ray Diffraction Study of Protic Ionic Liquid/Water Mixtures. In: International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices ILED-2. Roma, 9-11 Giugno 2010
- 115) 2010 - Relazione Orale  
**Contrani L**, Padua A. H. H, Caminiti R, Passerini S, Appetecchi G B., Montanino M, Triolo A. Anion conformational patterns and bulk properties in bis(perfluoroalkylsulfonyl)imide -based ionic liquids studied with X-Ray Diffraction and Molecular Dynamics simulations. In: International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices ILED-2., Roma, 9-11 Giugno 2010
- 116) 2010 - Relazione Orale  
Bodo E, Contrani L, Triolo A, Caminiti R. Atomistic simulations of Imidazolium-based Ionic Liquids: current challenges for theoretical models. In: International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices ILED-2. Roma, 9-11 giugno 2010
- 117) 2010 - Poster  
**Contrani L**, Russina O, Borghols W, Maricola F C, Triolo A, Caminiti R (2010). Intermolecular Interactions in Protic Ionic Liquids: An X-Ray/Neutron Scattering and Molecular Simulation Study of EAN and PAN. In: Winter Modeling. Pisa, 26 febbraio 2010
- 118) 2009 - Poster  
**Contrani L**, Russina O, Triolo A, Maricola Cesare F, Caminiti R (2009). An Energy Dispersive study of liquid dimethyl carbonate. In: Book of Abstracts EMLG-JMLG Meeting 2009 Intermolecular Interactions and Liquid Structure. University of Salzburg (Austria), 6 - 10 settembre 2009

119) 2008 - Relazione Orale

Triolo A, Russina O, Fazio B, Gontrani L, Caminiti R, Hardacre C, Mullan C, Pappas C, Beiner M. Morphology and Relaxation processes in a Rtil: the case of [C6mim][Tf2N]. In: Conference on Molten Salts and Ionic Liquids., 24-29 Agosto, vol. 1, Copenhagen (Danimarca)

120) 2008 - Poster

Bellagamba M, Campetella M, Bencivenni L, **Gontrani L**, Guidoni L, Mancini G, Pieretti A, Sadun C, Ramondo F (2008). Pure and Solvated Azoles: a Combined Theoretical and X-Ray Diffraction Study of 1,2,3 Triazole. In: Book of abstracts. Sala Celestiniana – S. Maria di Collemaggio - L'Aquila, 23-25/6 2008

121) 2006 - Poster

Sanna N, Chillemi G, **Gontrani L**, Grandi A, Castelli S, Desideri A, Cimino P, Barone V (2006). A Quantum-Mechanical Study of the Anticancer Drugs Camptothecin and Topotecan. In: Strumenti computazionali per la comprensione della materia: dagli aggregati molecolari e le fasi condensate alle problematiche chimiche analitiche ed ambientali. Venezia - Isola di San Servolo, 18-21/12/2006

#### **PARTECIPAZIONE A CORSI, CONGRESSI, WORKSHOP**

---

10/2019 – Nanoscience and Nanotechnology, INFN (Frascati), 15-18 ottobre 2019

7/2019 - XLVII Congresso della divisione della società chimica italiana, Roma. 1-4 Luglio 2019

11/2018 Convegno “Le Scienze e la Grande Guerra – Scienza, Industria e Sanità Pubblica, CNR, Roma, 16 novembre 2018

10/2018 - 1 day workshop on computer simulation in the physics and life sciences, Temple Univ. Rome Campus (Roma) - 26 Ottobre 2018

6/2018 - XLVI Congresso della divisione della società chimica italiana, Bologna. 25-28 Giugno 2018

10/2017 - XVII Convegno di Storia e Fondamenti della Chimica, Roma, Accademia dei XL, 10-12 Ottobre 2017

9/2017 - XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Paestum, 10-14 Settembre 2017

4/2017 - Convegno "Molecole nel mondo dei quanti: dagli orbitali alle reti di spin" - The quantum world of molecules: from orbitals to spin networks". Fondazione “G. Donegani”, Accademia dei Lincei, Roma, 27-28 Aprile 2017

4/2017 - I primi 5 anni del Laboratorio di Nanotecnologie e Nanoscienze del CNIS”, Centro di ricerca CNIS, Università di Roma La Sapienza, 5 Aprile 2017

6/2016 – ISXB2, 2nd International Symposium on Halogen Bonding, Göteborg (Svezia), 6-10 Giugno 2016, Göteborg (Svezia)

12/2015 – DCTC 3 - III Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e computazionale della Società Chimica Italiana, 14-16 Dicembre 2015, CNR (Roma)

6/2015 – THEOBIO 2015 – 7th International Theoretical Biophysics Symposium (Cagliari)

5/2015 – Computer simulations for condensed phase systems. From correlated electrons to novel materials – CNR, Roma

3/2014 – Winter Modeling 2014 (Modena)

3/2013 – ADD2013 (ILL, Grenoble, Francia). Convegno “Analysis of Diffraction Data in Real Space”

6/2010 – CECAM (Losanna, Svizzera). Workshop “Advances in the Implementation of Polarizable Force Fields for Molecular Simulations” (a cura di M. Masia e E. Guardia)

2/2010 - Winter Modeling 2010 Pisa, 26 febbraio

9/2009 - EMLG-JMLG Annual Meeting 2009, Intermolecular Interactions and Liquid Structure  
University of Salzburg, Faculty of Natural Sciences, Salzburg, Austria

8/2009 - International Discussion Meeting on Relaxation in Complex Systems, Dipartimento di Fisica, Sapienza  
Università di Roma

5/2007 - 6th workshop on molecular theories and simulations, Gaeta

4-5/2007 – Corso “Message-Passing Programming with MPI” (EPCC, Edinburgh)

12/2006 - VI Convegno Nazionale Gruppo Interdivisionale Chimica Computazionale (GICC) Isola di San Servolo,  
Venezia

11/2005 - Corso teorico “L’impatto della Bioinformatica sulle scienze biomediche”, Istituto Dermopatico dell’Immacolata  
(IDI), Roma

09/2005 - Scuola estiva di calcolo avanzato (C.A.S.P.U.R) - I edizione Villa Montecucco – Castel Gandolfo (RM)

11/2004 - Corso sulla privacy - Soc. CONSIPA / Roma

3/2003 - 3rd International Workshop on New Approaches in Drug Design Schloss Rauschholzhausen, Marburg, -  
Germania

9/2002 - XVI Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana - Sorrento  
(NA)

9/1999 - Scuola di Calcolo Parallelo - CINECA, Casalecchio di Reno (BO)

6/1999 - V convegno “Sistemi Complessi: struttura, proprietà, reattività e dinamica”, Villa Monastero - Varenna (CO)

4/1998 - Gaussian Workshop - C.A.S.P.U.R., Università di Roma “La Sapienza”

**Il sottoscritto Lorenzo Gontrani DICHIARA, che tutto quanto espressamente  
dichiarato nel presente *Curriculum Vitae* corrisponde a verità, ai sensi degli  
articoli 46 e 47 del D.P.R. 445 del 2000.**

Roma, 22/02/2021