

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n. 1 posto/i di Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24, comma 3, lettera a) della Legge 240/2010 per il settore concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, settore scientifico-disciplinare CHIM/02 - chimica fisica presso il Dipartimento di CHIMICA, (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 32 del 23/04/2019) Codice concorso 4036

[Lorenzo Gontrani] **CURRICULUM VITAE**

INFORMAZIONI PERSONALI (NON INSERIRE INDIRIZZO PRIVATO E TELEFONO FISSO O CELLULARE)

COGNOME	GONTRANI
NOME	LORENZO
DATA DI NASCITA	6 APRILE 1974

Il sottoscritto Lorenzo Gontrani

DICHIARA

DI AVER CONSEGUITO la maturità scientifica presso il Liceo Scientifico "Augusto Righi", Roma, il 7 luglio 1992, con votazione 60/60;

DI AVER CONSEGUITO la Laurea in Chimica (Vecchio ordinamento) con lode presso l'Università di Roma "La Sapienza", il 7 aprile 1998, discutendo una tesi dal titolo: "Studio delle interazioni molecola-molecola e molecola-solvente mediante diffrazione a raggi X, spettroscopia infrarossa e calcolo quantomeccanico" – relatore Prof. Ruggero Caminiti;

DI AVER CONSEGUITO il Dottorato di Ricerca in Scienza Chimiche presso l'Università di Pisa il 18 febbraio 2002, discutendo una tesi dal titolo: "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" – Supervisore Prof. Jacopo Tomasi;

DI AVER CONSEGUITO l'abilitazione a professore di seconda fascia nel settore concorsuale 03/A2 (SSD CHIM/02) con validità 01/12/2014 - 01/12/2020, prorogata per il periodo 31/07/2018 – 31/07/2024 ;

DI RICOPRIRE / AVER RICOPERTO I SEGUENTI RUOLI in ambito accademico o altri enti di ricerca affini:

Assegnista di Ricerca L 240/2010 presso Università di Bologna, Dipartimento di Chimica, "G. Ciamician", dal 9 aprile 2018 all'8 aprile 2019, argomento della ricerca: "studio teorico e sperimentale del legame alogeno in campioni liquidi";

Assegnista di ricerca L 240/10 presso l'Università degli Studi di ROMA "La Sapienza" Dipartimento di Chimica dal 1 febbraio 2017 al 31 gennaio 2018, argomento della ricerca: "Utilizzo del prototipo EDXD per ricerca sui liquidi ionici";

Assegnista di ricerca L 240/10 presso l'Università degli Studi di ROMA "La Sapienza" Dipartimento di Chimica dal 1 febbraio 2016 al 31 gennaio 2017, argomento della ricerca: "Utilizzo del prototipo EDXD per ricerca sui liquidi ionici";

Assegnista di ricerca L 240/10 presso l'Università degli Studi di ROMA "La Sapienza" Dipartimento di Chimica dal 1 maggio 2014 al 30 aprile 2015, 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";

Collaborazione coordinata continuativa nell'ambito del 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, presso il Consiglio Nazionale delle Ricerche, Istituto di struttura della materia, area della ricerca "Tor Vergata", dal 02 maggio/2011 al 1 maggio 2014;

Assegnista di ricerca presso l'Università degli Studi di ROMA "La Sapienza" Dipartimento di Scienze della Terra, dal 01 luglio 2009 al 30 giugno 2010, 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";

Assegnista di ricerca presso l'Università degli Studi di ROMA "La Sapienza" Dipartimento di Scienze della Terra, dal 01 luglio 2009 al 30 giugno 2010, 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”;

Assegnista di ricerca presso l'Università degli studi di Cagliari, Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, dal 16 novembre 2007 al 15 novembre 2008, argomento della ricerca "Sviluppo di metodi di validazione delle simulazioni di Dinamica Molecolare”;

Borsista presso CASPUR – Centro di Applicazioni di Supercalcolo Per Università e Ricerca, dal 1 giugno 2006 al 1 novembre 2007;

DI AVER RICOPERTO i seguenti ruoli in ambito non accademico:

Ricercatore presso Colosseum Combinatorial Chemistry Centre for Technology (C4T) – “start-up” biotech tra Università di Roma “Tor Vergata” e Tecnofarmaci S. C. p. A., dal 1 Ottobre 2002 al 10 Giugno 2006, co-finanziata nell'ambito del progetto MURST “Individuazione di molecole di interesse farmaceutico con tecniche di drug design e chimica combinatoriale in una nuova struttura organizzativa”;

DI AVER EROGATO i seguenti corsi:

Modulo di chimica computazionale e interpretazioni di dati diffrazionometrici all'interno del corso “Chimica Fisica III” per Chimica Industriale del Dipartimento di Chimica, Università di Roma “La Sapienza”, anni accademici 2011-2012, 2012-2013, 2013-2014, 2014-2015, 2015-2016 e 2016-2017, di 20 ore ciascuno (2CFU), totale 120 ore, e relative esercitazioni frontali al computer (per gruppi di uno/due studenti);

Lezioni teorico-pratiche frontali di “Computational Chemistry” e metodiche di “automated docking – virtual screening” nell'ambito dei corsi di formazione per il progetto MIUR N°Art 11 Legge 451/94, nel febbraio 2002 totale 21 ore;

Tutoraggio nel laboratorio di Esercitazioni di Preparazioni Chimiche I, anno accademico 1994-1995, corso di Laurea in Chimica – Università di Roma “La Sapienza”, totale 150 ore;

DI ESSERE ASSEGNATARIO del corso “Metodologie di base della Chimica Computazionale” (6 CFU) per il corso di Dottorato in Scienze Chimiche (XXXIV ciclo) - secondo semestre dell'anno accademico 2018/2019;

DI AVER COORDINATO, come supervisore, le attività di tesi di laurea triennale (12), magistrale (6), dottorato di ricerca (6) nel periodo 2010-2018;

DI SERVIRE come revisore (reviewer) per le seguenti riviste internazionali:

Journal of Physical Chemistry B (American Chemical Society), Journal of Chemical Physics (American Institute of Physics), Physical Chemistry Chemical Physics, RSC Advances (Royal Society of Chemistry)

Angewante Chemie International Edition (Gesellschaft Deutscher Chemiker -German Chemical Society, GDCh), Dalton transactions (Royal Society of Chemistry). Structural Chemistry (Elsevier) Research on Chemical Intermediates (Elsevier), Journal of Applied Physics (American Institute of Physics), Journal of Molecular Liquids (Elsevier), Journal of Raman Spectroscopy (Wiley), ACS Sustainable Chemistry & Engineering (American Chemical Society), Topics in Current Chemistry, (American Chemical Society), Computational and Structural Biotechnology Journal (Elsevier);

DI COORDINARE, in qualità di “collecton editor”, la pubblicazione del volume Topical Collection "Molecular Liquids" della rivista Molecules (MDPI) e come “Guest Editor” la pubblicazione dello Special Issue "Materials Science and X-ray Diffraction" della rivista Symmetry (MDPI);

DI AVER OTTENUTO, in qualità di Referente Principale (PI), i seguenti finanziamenti per progetti di ricerca basati su bandi competitivi con revisione tra pari:

“Modeling of ionic liquids containing WCA”, 100000 ore di calcolo FTE, CASPUR computing grant: std12-011, anno 2012;

“Protic Ionic Liquids”, 90000 ore calcolo FTE, CASPUR computing grant: std11-465, anno 2011;

“Structure and dynamics in Room Temperature Ionic Liquids” 90000 ore calcolo FTE, CASPUR computing grant: std10-181, anno 2010;

“Structure and dynamics in Room Temperature Ionic Liquids” 90000 ore calcolo FTE, CASPUR computing grant: std09-320, anno 2009;

DI PARTECIPARE al seguente progetto di ricerca:

PRACE TIER0 (17th Access call) “ADRENALINE – hAliDe peRovskites sEqueNtiAL depositioN mEchanism (by ab initio rare events simulations).”, 78000000 ore calcolo FTE

E DI AVER PARTECIPATO ai seguenti progetti di ricerca:

PRACE TIER0 (6th Regular Call). Progetto: “Ab initio molecular dynamics of lanthanides in protic ionic liquids”, 8166667 ore calcolo FTE, anno 2013;

PRACE TIER0 (8th Regular Call). Progetto: “Amino-acid anions in organic compounds: charting the boundary of room temperature Ionic Liquids”, 8166667 ore calcolo FTE, anno 2014;

Progetto Awards Università La Sapienza “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, 55000 euro, anno 2013;

Progetto FIRB RBFR086BOQ "Structure and dynamics of ionic liquids", 300000 euro, anni 2011-2014;

Progetto Ateneo C26A113ZNZ "Sintesi e caratterizzazione di nuovi liquidi ionici chirali" 13000 Euro, anno 2011;

Progetto Ateneo C26A10H5T8 “Protic ionic liquids: a structural and spectroscopic study by means of experimental and computational techniques”, (85000 euro, anno 2010);

Progetto PRIN 2009WHPHRH - "Struttura e Dinamica di Liquidi Ionici e loro miscele", area 03, 231000 euro, anni 2008-2009;

Progetto Ateneo C26A07TZZM “Studio delle proprietà e caratterizzazione di molecole organiche mediante diffrazione di raggi x e calcoli teorici”, 38600 euro, anno 2007;

Progetto MIUR (MURST) “Individuazione di molecole di interesse farmaceutico con tecniche di drug design e chimica combinatoriale in una nuova struttura organizzativa”, N°Art 11 Legge 451/94 presso C4T, “start-up” biotech tra Università di Roma “Tor Vergata” e Tecnofarmaci S. C. p. A., anni 2002-2006;

DI AVER RICEVUTO “beamtime” (tempo macchina) presso il sincrotrone ESRF come proponente principale (PI) del progetto CH-5455 “Proton transfer in alkylammonium-based ionic liquids binary mixtures”, dal 20 al 22 aprile 2018;

DI AVER TRASCORSO i seguenti periodi di ricerca all'estero:

Laboratorio QUILL, Queen's University of Belfast, Belfast (Irlanda del Nord, UK), svolgendo sintesi e caratterizzazioni chimico fisiche di Deep Eutectic Solvents (DES) basati su acidi carbossilici e polialcoli, come misure di densità e viscosità al variare della temperatura, spettri ATR, ecc. giugno 2018;

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. Estensione del campo di forze a nuovi gruppi funzionali, dicembre 2009;

DI PRENDERE PARTE alle seguenti collaborazioni scientifiche:

Prof. Fabio Ramondo (Università dell'Aquila), nell'ambito della caratterizzazione teorica di sistemi liquidi (molecolari e ionici) e di interazioni di legame idrogeno;

Dott.ssa Francesca Mocci (Università di Cagliari), nell'ambito della caratterizzazione di liquidi ionici e loro miscele mediante spettroscopia NMR;

Prof. Leonardo Guidoni (Facoltà di Ingegneria, Università dell'Aquila), nell'ambito della caratterizzazione teorica di sistemi liquidi e solidi con tecniche di dinamica molecolare ab initio (AIMD);

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 liquidi ionici e miscele con liquidi molecolari 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;

DI AVER PUBBLICATO i seguenti 81 articoli su rivista, 2 capitoli e 1 curatela di libro, e 22 contributi in atti di convegno (in neretto se autore corrispondente o presentatore del contributo; il numero di citazioni WOS e Scopus al 21 maggio 2019 è riportato in calce):

1) 2019 - Articolo in rivista

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 DOI: 10.1039/C9CP00571D WOS 0 Scopus 0;

2) 2019 - Articolo in rivista

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 Material Chemistry A, DOI: 10.1039/C9TA00715F WOS 0 Scopus 0;

3) 2019 - Articolo in rivista

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 liquidsFrontiers in Chemistry 7 (295) WOS 0 Scopus 0;
WOS 0 Scopus 0;

4) 2019 - Articolo in rivista

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 WOS 0 Scopus 0;

5) 2018 - Articolo in rivista

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: 2018, DOI: 10.1039/C8CP06728G WOS 1 Scopus 1

6) 2018 - Articolo in rivista

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 WOS 0 Scopus 0;

7) 2018 - Articolo in rivista

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 WOS 2 Scopus 2;

8) 2018 - Articolo in rivista

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 WOS 1 Scopus 0;

9) 2018 - Articolo in rivista

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 WOS 0 Scopus 9

10) 2018 - Articolo in rivista

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 WOS 1 Scopus 1

11) 2018 - Articolo in rivista

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 WOS 1 Scopus 0

12) 2018 - Articolo in rivista

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 WOS 2 Scopus 4

13) 2018 - Articolo in rivista

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, WOS 3 Scopus 7

14) 2017 - Articolo in rivista

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 WOS 4 Scopus 4

15) 2017 - Articolo in rivista

Gontrani L, Leonelli F, Campetella M, An X-Ray and Computational Study of Liquid Pentylammonium Nitrate, *Chemical Physics Letters*, 687, 38-43 WOS 2 Scopus 3

16) 2017 - Articolo in rivista

Gontrani L, Scarpellini E, Caminiti R, Campetella M Bio Ionic Liquids and Water Mixtures: a Structural Study, *RSC Advances* 7 (31), 19338-19344 WOS 2 Scopus 3

17) 2017 - Articolo in rivista

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 WOS 3 Scopus 3

18) 2017 - Articolo in rivista

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 WOS 7 Scopus 10

19) 2017 - Articolo in rivista

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, WOS 4 Scopus 5

20) 2017 - Articolo in rivista

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 WOS 2 Scopus 2

21) 2017 - Articolo in rivista

Mariani A, Caminiti R, Ramondo F, Salvitti G, Mocci 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 WOS 4 Scopus 4

22) 2017 - Articolo in rivista

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 WOS 3 Scopus 3

23) 2017 - Articolo in rivista

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 WOS 5 Scopus 7

24) 2017 - Articolo in rivista

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 WOS 7 Scopus 7

25) 2016 - Articolo in rivista

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 WOS 12 Scopus 12

26) 2016 - Articolo in rivista

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 WOS 4 Scopus 3

27) 2016 - Articolo in rivista

Campetella, M, Martino D C; 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 WOS 11 Scopus 13

28) 2016 - Articolo in rivista

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 WOS 5 Scopus 5

29) 2016 - Articolo in rivista

Russina O, De Santis S, Gontrani L, Micro- and mesoscopic structural features of a bio-based choline amino acid ionic liquid. RSC Advances doi: 10.1039/C6RA02142E WOS 6 Scopus 8

30) 2016 - Articolo in rivista

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 doi: 10.1016/j.chemphys.2016.03.027 WOS 2 Scopus 3

31) 2016 - Articolo in rivista

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 doi: 10.1039/C5CP07953E WOS 9 Scopus 9

32) 2016 – Articolo in rivista

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 WOS 13 Scopus 16

33) 2016 – Articolo in rivista

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 WOS 4 Scopus 5

34) 2016 - Articolo in rivista

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 WOS 22 Scopus 21

35) 2015 - Articolo in rivista

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 WOS 10 Scopus 11

36) 2015 – Articolo in rivista

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 WOS 42 Scopus 48

37) 2015 – Articolo in rivista

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.jpcb.5b05022 WOS 9 Scopus 8

38) 2015 – Articolo in rivista

Campetella M, De Santis S, Caminiti R, Ballirano, Sadun C, Tanzi L, Gontrani L, Is a medium-range order pre-peak possible for ionic liquids without an aliphatic chain?, *RSC Advances*, 5, 50938-50941 doi: 10.1039/C5RA07567J WOS 12 Scopus 15

39) 2015 – Articolo in rivista

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 WOS 21 Scopus 25

40) 2015 - Articolo in rivista

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 WOS 10 Scopus 11

41) 2015 – Articolo in rivista

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 WOS 23 Scopus 23

42) 2014 – Articolo in rivista

Usula M, Porcedda S, Mocci F, Gontrani L, Caminiti R, Marincola FC, NMR, Calorimetry, and Computational Studies of Aqueous Solutions of N-Methyl-2-pyrrolidone, *Journal of Physical Chemistry B* 118 (35) 10493-10502 WOS 10 Scopus 10

43) 2014 – Articolo in rivista

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 WOS 21 Scopus 21

44) 2014 – Articolo in rivista

Usula M, Mocci F., Cesare Marincola F., Porcedda S., **Gontrani L.**, Caminiti R.
The Structural Organization of N-Methyl-2-pyrrolidone plus Water Mixtures: A Densitometry, X-ray Diffraction and Molecular Dynamics Study
Journal of Chemical Physics 140 (12) 124503 doi: 10.1063/1.4869235 WOS 18 Scopus 16

45) 2014 – Articolo in rivista

Carbone M, **Gontrani L**, Higher fullerenes: Compositional analysis by EDXD and molecular dynamics, *AIP Conference Proceedings* 1603, 40-46 WOS 0 Scopus 0

46) 2014 – Articolo in rivista

Carbone M, **Gontrani L**, Brominated carbon black: An EDXD study

AIP Conference Proceedings 1603, 47-52 WOS 0 Scopus 0

47) 2014 - Articolo in rivista

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 WOS 22 Scopus 26

48) 2014 - Articolo in rivista

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 WOS 2 Scopus 2

49) 2014 – Capitolo di Libro

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 Numero totale di scaricamenti del capitolo ad oggi: 1611

50) 2014 – Curatela di Libro (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, ISSN: 2213-1736 doi: 10.1007/978-3-319-01698-6 Numero totale di scaricamenti di capitoli: 2019: 333; 2018: 964; 2017: 1288; 2016: 1477; 2015: 2041; 2014: 3792; 2013: 469

51) 2014 - Articolo in rivista

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 WOS 10 Scopus 10

52) 2013 - Articolo in rivista

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 WOS 23 Scopus 24

53) 2013 - Articolo in rivista

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*, ISSN: 1040-0400, doi: 10.1007/s11224-013-0206-4 WOS 11 Scopus 12

54) 2013 - Articolo in rivista

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*, vol. 138, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.4803799 WOS 23 Scopus 25

55) 2013 - Capitolo di Libro

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

56) 2012 - Articolo in rivista

Russina O, Triolo A, Gontrani L, Caminiti R Mesoscopic structural heterogeneities in Room-Temperature Ionic Liquids. *Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 3, p. 27-33, ISSN: 1948-7185, doi: 10.1021/jz201349z2012 WOS 228 Scopus 234

57) 2012 - Articolo in rivista

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*, vol. 116, p. 2104-2113, ISSN: 1520-6106, doi: 10.1021/jp2120466 WOS 20 Scopus 20

58) 2012 - Articolo in rivista

Gontrani L, Caminiti R. The structure of liquid N-methyl pyrrolidone probed by x-ray scattering and molecular simulations. *Journal of Chemical Physics*, vol. 136, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.3684988 WOS 10 Scopus 10

59) 2012 - Articolo in rivista

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*, vol. 116, p. 13024-13032, ISSN: 1520-6106, doi: 10.1021/jp306110g WOS 46 Scopus 47

60) 2012 - Articolo in rivista

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*, vol. 116, p. 13448 -13458, ISSN: 1520-6106, doi: 10.1021/jp306982e WOS 32 Scopus 30

61) 2012 - Articolo in rivista

Mangialardo S, Gontrani L, Leonelli F, Caminiti R, Postorino P. Role of ionic liquids in protein refolding: native/fibrillar versus treated lysozyme. *RSC Advances*, vol. 2, p. 12329-12336, ISSN: 2046-2069, doi: 10.1039/C2RA21593D WOS 16 Scopus 20

62) 2012 - Articolo in rivista

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*, vol. 13, p. 1339-1346, ISSN: 1439-4235, doi: 10.1002/cphc.201100810 WOS 26 Scopus 29

63) 2011 - Articolo in rivista

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*, vol. 134, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.3565458 WOS 63 Scopus 69

64) 2011 - Articolo in rivista

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*, vol. 115, p. 4887-4899, ISSN: 1520-6106, doi: 10.1021/jp2010138 WOS 24 Scopus 28

65) 2011 - Articolo in rivista

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)₂Th₂Pyz], its Palladium(II) Complex [(CN)₂Th₂Pyz(PdCl₂)₂] and the Related Pentametallic Pyrazinoporphyrazines [(PdCl₂)₄Th₈TPyzPz₂M] (M = Mg II(H₂O), Zn II). *Inorganic Chemistry*, vol. 50, p. 12116-12125, ISSN: 0020-1669, doi: 10.1021/ic201678p WOS 8 Scopus 7

66) 2011 - Articolo in rivista

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*, vol. 115, p. 11805-11815, ISSN: 1520-6106, doi: 10.1021/jp206831d WOS 12 Scopus 10

67) 2010 - Articolo in rivista

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*, vol. 114, p. 16398-16407, ISSN: 1520-6106, doi: 10.1021/jp1093299 WOS 83 Scopus 83

68) 2010 - Articolo in rivista

Bodo E, Gontrani L, Triolo A, Caminiti R. Structural Determination of Ionic Liquids with Theoretical Methods: C₈mimBr and C₈mimCl. Strength and Weakness of Current Force Fields. *Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 1, p. 1095-1100, ISSN: 1948-7185, doi: 10.1021/jz100146r WOS 23 Scopus 24

69) 2010 - Articolo in rivista

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*, vol. 493(4-6), p. 259-262, ISSN: 0009-2614, doi: 10.1016/j.cplett.2010.05.042 WOS 72 Scopus 76

70) 2010 - Articolo in rivista

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*, vol. 131, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.3273847 WOS 34 Scopus 36

71) 2009 - Articolo in rivista

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*, vol. 11, p. 9431-9439, ISSN: 1463-9076, doi: 10.1039/b909388e WOS 5 Scopus 5

72) 2009 - Articolo in rivista

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*, vol. 113, p. 353-359, ISSN: 1089-5639, doi: 10.1021/jp809076t WOS 3 Scopus 4

73) 2009 - Articolo in rivista

Russina O, Triolo A, Gontrani L, Caminiti R, Xiao D, Hines LG, Bartsch RA, Quitevis EL, Pleckhova NV, 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*, vol. 21, ISSN: 0953-8984, doi: 10.1088/0953-8984/21/42/424121 WOS 201 Scopus 229

74) 2009 - Articolo in rivista

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*, vol. 113, p. 5369-5375, ISSN: 1520-6106, doi: 10.1021/jp809801y WOS 29 Scopus 29

75) 2009 - Articolo in rivista

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, vol. 113, p. 9235-9240, ISSN: 1520-6106, doi: 10.1021/jp808333a WOS 77 Scopus 77

76) 2008 - Articolo in rivista

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, vol. 139, p. 23-28, ISSN: 0167-7322, doi: 10.1016/j.molliq.2007.10.006 WOS 21 Scopus 24

77) 2008 - Articolo in rivista

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, vol. 3, p. 266-279, ISSN: 1860-7179, doi: 10.1002/cmdc.200700232 WOS 14 Scopus 16

78) 2008 - Articolo in rivista

Alcaro S, Gontrani L, Incani O, Ortuso F. Computational methods applied to the discovery of stem cell factor ligands. Theoretical Chemistry Accounts, vol. 120, p. 523-531, ISSN: 1432-881X, doi: 10.1007/s00214-008-0431-x WOS 0 Scopus 1

79) 2007 - Articolo in rivista

Ramondo F, Bencivenni L, Caminiti R, Pieretti A, Gontrani L. Dimerisation of urea in water solution: a quantum mechanical investigation. Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 9, p. 2206-2215, ISSN: 1463-9076, doi: 10.1039/b617837e WOS 28 Scopus 28

80) 2006 - Articolo in rivista

Gontrani L, Ramondo F, Caminiti R. Energy dispersive X-ray diffraction and molecular dynamics meet: The structure of liquid pyrrole. Chemical Physics Letters, vol. 417, p. 200-205, ISSN: 0009-2614, doi: 10.1016/j.cplett.2005.10.021 WOS 26 Scopus 30

81) 2006 - Articolo in rivista

Gontrani L, Ramondo F, Caminiti R., Furan and thiophene in liquid phase: An X-ray and molecular dynamics study. Chemical Physics Letters, vol. 422, p. 256-261, ISSN: 0009-2614, doi: 10.1016/j.cplett.2006.02.069 WOS 11 Scopus 12

82) 2001 - Articolo in rivista

Ramondo F, Pieretti A, Gontrani L, Bencivenni L., Hydrogen bonding in barbituric and 2-thiobarbituric acids: a theoretical and FT-IR study. Chemical Physics, vol. 271, p. 293-308, ISSN: 0301-0104, doi: 10.1016/S0301-0104(01)00440-2 WOS 27 Scopus 31

83) 2000 - Articolo in rivista

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, vol. 500, p. 113-127, ISSN: 0166-1280, doi: 10.1016/S0166-1280(00)00390-0 WOS 87 Scopus 93

84) 1999 - Articolo in rivista

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, vol. 301 (1-2), p. 131-137, ISSN: 0009-2614, doi: 10.1016/S0009-2614(99)00005-6 WOS 23 Scopus 25

Nuovi articoli (in revisione, inviati o in preparazione)

85) 2019 – Articolo in rivista

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 Synthetic Procedure, ACS Sustainable Chemistry & Engineering, in revisione

Contributi in Atti di Convegno

86) 2018 – 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

87) 2017 – Poster

Gontrani L, Salma U, Caminiti R, To swell or to shrink? Alkylammonium Alkanoates plus Molecular Solvents, Paestum, XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Paestum, 10-14 Settembre 2017

88) 2017 – Orale

A. Mariani, R. Caminiti, L. Gontrani 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

89) 2017 – 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

90) 2016 – Orale

Gontrani L, Portalone G, Campetella 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

91) 2015 – Orale

Bencivenni L, Bodo E, Bovi D, Campetella 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

92) 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,

93) 2015 – Orale

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

94) 2014 – Orale

Gontrani 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

95) 2013 - Poster

Gontrani 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

96) 2011 - Orale

Russina O, Gontrani 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

97) 2011 - Orale

Russina O, Gontrani L, Lo Celso F, Caminiti R, Triolo A. Morphology of Poly(Ethylene Oxide)-RTILs Mixtures: Saxes and MD Studies. In: 4-th Conference on Ionic liquids . Washington, 15-18 Giugno 2011

98) 2011 - Orale

Triolo A, Russina O, Gontrani 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

99) 2011 - Orale

Russina O, Gontrani 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

100) 2010 - Orale

Migliorati V, Gontrani 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

101) 2010 - Orale

Gontrani 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

102) 2010 - Orale

Bodo E, Gontrani 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

103) 2010 - Poster

Gontrani L, Russina O, Borghols W, Cesare Marincola F, 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

104) 2009 - Poster

Gontrani L, Russina O, Triolo A, Marincola F. C, 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

105) 2008 - Orale

Triolo A, Russina O, Fazio B, Gontrani L, Caminiti R, Hardacre C, Mullan C, Pappas C, Beiner M (2008). Morphology and Relaxation processes in a Rtil: the case of [C6mim][Tf2N]. In: Conference on Molten Salts and Ionic Liquids., 24-29 August, vol. 1, Copenhagen (Danimarca)

106) 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. XXVIII Convegno Interregionale TUMA 2008, Società chimica italiana, Sala Celestiniana – S. Maria di Collemaggio - L'Aquila, 23-25/6 2008

107) 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;

CHE IL SOMMARIO degli indici citazionali per i suddetti lavori, aggiornato al 21 maggio 2019, è:

Totale citazioni:

1784 (Scopus) indice H 24

2038 (Google Scholar) indice H 24;

Fattore di impatto totale (IF dell'anno della pubblicazione, JCR-WOS) 259

Numero medio di citazioni (Scopus) 22,46

Indice H normalizzato (Scopus)*1,40

Numero di articoli come autore corrispondente: 33

Numero di articoli come primo autore: 19

Numero di articoli come ultimo autore: 21

Complessivamente, numero di articoli come "key author": 48

Riferimenti:

Scopus Author ID: 6506613970

ResearcherID: L-6061-2014

OrcID:0000-0001-8212-702

* Normalizzazione per l'età accademica (16,42). Nel calcolo non sono stati considerati i 4,5 anni passati nel centro di ricerca C4T durante i quali non era possibile pubblicare liberamente (poiché sotto contratto industriale con clausole di riservatezza);

Totale citazioni (di 3 libri):

ISBN 978-3-642-30985-4 (capitolo) 4 citazioni, 1200 scaricamenti

ISBN 978-3-319-01698-6 (libro) 20 citazioni, 10400 scaricamenti

ISBN 978-3-319-01698-6 (capitolo) 1 review, 1611 scaricamenti;

DI AVER PARTECIPATO ai seguenti corsi, congressi, workshop:

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)

6/2010 - International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices ILED-2. Roma, 9-11 Giugno 2010

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

6/2008 - XXVIII Convegno Interregionale TUMA 2008, Società chimica italiana, L'Aquila

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 Montecuccio – Castel Gandolfo (RM)

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

3/2003 - 3rd International Workshop on New Approaches in Drug Design Schloss Rauischholzhausen, 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"

DI CONOSCERE la lingua inglese a livello approfondito, di possedere la certificazione "First Certificate in English", conseguita nel giugno 1990 presso "The British Institute" e della lingua spagnola a livello intermedio (certificazione "nivel intermedio" ottenuta presso l'istituto Cervantes di Roma).

Data

21 maggio 2019

Luogo

Roma