

Lorenzo GONTRANI

Ricercatore TDb SSD: CHIM/03 (Chimica inorganica) Stanza: AB – 6

Email: lorenzo.gontrani@uniroma2.it

Biographical Info

LG graduated in chemistry (summa cum laude) at Rome Sapienza university in 1998 and received a PhD degree in Chemical Sciences at Pisa University in 2002. At present, he is assistant professor of Inorganic Chemistry in the University of Rome Tor Vergata. He has a solid background in the computational description of complex chemical systems (ab initio, classical molecular dynamics), fully integrated with experimental techniques, like spectroscopic and diffractometric analyses. In particular, his current research interests are mainly focused on

- Synthesis of metal oxide nanoparticles with traditional and innovative media, like Deep Eutectic Solvents and ionic liquids
- Powder XRD analysis (Rietveld method), SEM microscopy and DRS measurements of nanoparticles and pigments
- Calculation of electronic properties (bandgap and UV-Vis spectra) of dyes for DSSC, in various environments

In the past, he worked also in many different fields, like i) X-Ray diffraction and Molecular Dynamics simulations of liquid systems ii) Modeling of solvent effects with polarizable continuum models (PCM) and quantum mechanical calculations iii) Drug discovery and bioinformatics projects, iv) Code development/optimization and computer cluster management at CASPUR.

He took part to various national and international research projects as principal investigator or as investigator.

He co-authored 104 peer-reviewed papers (details can be found in <https://scholar.google.it/citations?user=weE3KRQAAAAJ&hl=it>), 2 book chapters, has edited one monograph dedicated to the structural aspects of ionic liquids and serves as reviewer of several journals in the field of computational chemistry,

Informazioni biografiche

LG si è laureato in chimica (con lode) all'Università di Roma Sapienza nel 1998 e ha conseguito il dottorato di ricerca in Scienze Chimiche all'Università di Pisa nel 2002. Attualmente è ricercatore TDb in Chimica Inorganica presso l'Università di Roma Tor Vergata. Ha un solido background nella descrizione computazionale di sistemi chimici complessi (ab initio, dinamica molecolare classica), pienamente integrato con tecniche sperimentali, come analisi spettroscopiche e diffrattometriche. In particolare, i suoi attuali interessi di ricerca si concentrano principalmente su:

Sintesi di nanoparticelle di ossidi metallici con mezzi tradizionali e innovativi, come solventi eutettici profondi e(DES) e liquidi ionici

Analisi XRD in polvere (metodo Rietveld), microscopia SEM e misure DRS di nanoparticelle e pigmenti

Calcolo delle proprietà elettroniche (bandgap e spettri UV-Vis) di coloranti per DSSC, in vari ambienti.

In passato ha lavorato anche in molteplici campi, come i) diffrazione di raggi X e simulazioni di dinamica molecolare di sistemi liquidi ii) modellazione degli effetti dei solventi con modelli continui polarizzabili (PCM) e calcoli di meccanica quantistica iii) progetti drug discovery e bioinformatica, iv) sviluppo/ottimizzazione di codici e gestione di cluster di computer presso il CASPUR.

Ha partecipato a diversi progetti di ricerca nazionali e internazionali come ricercatore principale o come investigatore.

È coautore di 104 articoli sottoposti a peer-review (dettagli possono essere trovati in <https://scholar.google.it/citations?user=weE3KRQAAAAJ&hl=it>), di 2 capitoli di libri, ha curato una monografia dedicata agli aspetti strutturali dei liquidi ionici ed è revisore di diverse riviste nel campo della chimica computazionale, dei liquidi ionici/DES e della scienza dei materiali. È membro della Società Chimica Italiana e di alcuni comitati editoriali. Ha presentato i risultati delle sue ricerche in diversi congressi nazionali e internazionali, anche come relatore su invito.

ID autore Scopus: 6506613970

Instagram: startnetics