



Aldo Ugolotti

Contatti

- Dipartimento di Scienza dei Materiali, U5, stanza 2123 2° piano
- Università degli Studi di Milano-Bicocca, via Cozzi 55, 20125, Milano
- Telefono: +39-02-6448-5171
- Email: aldo.ugolotti@unimib.it

2023 – posizione attuale

Ricercatore a tempo determinato A

- Attività di ricerca teorico-computazionale: studio ai principi primi della struttura e delle proprietà elettroniche, elastiche e termodinamiche di bulk e superfici di materiali semiconduttori di interesse per applicazioni di elettronica di potenza. Studio della crescita epitassiale di materiali tramite modelli basati sulla teoria classica di nucleazione, basati su parametri calcolati tramite simulazioni quanto meccaniche basate sulla teoria del funzionale densità (DFT) e sulla soluzione di modelli meccanici a ad elementi finiti (FEM).
- Ricerca svolta all'interno gruppo del Prof. Leonida Miglio, in collaborazione con gruppi sperimentali esterni; si sono considerati principalmente fasi allotrope di ossidi semiconduttori ad ampio gap, con substrati di ossidi a base Al o Si.
- Attività finanziata dal progetto PNRR 2022 Centro Nazionale Mobilità Sostenibile Missione 4.2.1.4 (MOST).

2019 – 2023

Assegnista di ricerca c/o Università di Milano-Bicocca

- Attività di ricerca teorico-computazionale: studio ai principi primi della geometria, delle proprietà elettroniche di stato fondamentale, di stato eccitato e reattività chimica in sistemi di interesse chimico-fisico. Definizione di modelli e loro analisi in rapporto a risultati sperimentali quali microscopia/spettroscopia tunnel STM/STS, fotoeccitazione di elettroni di core risonanti e non XPS/NEXAFS/UPS, spettroscopia ottica nell'infrarosso e nel visibile.
- L'attività si è svolta all'interno gruppo della Prof. Cristiana Di Valentin, in collaborazione con gruppi sperimentali esterni; si sono considerate principalmente superfici, di diversa natura, ovvero sia di materiali semiconduttori che metallici, ma anche sistemi di dimensionalità ridotta e/o derivati dal grafene, sia supportati che non. Nel dettaglio si è considerato l'effetto di difetti geometrici e la funzionalizzazione/doping tramite diverse specie chimiche, tra cui azoto, idrogeno, diversi metalli o molecole organiche.
- Posizione finanziata dal progetto PRIN n. 2017NYPHN8 (Metal Activated 2D cArbon-based platforMs, MADAM).

ATTIVITÀ DIDATTICA

Supervisione tesi

Attività di coordinamento e supervisione di tesisti magistrali e studenti di dottorato.

Incarichi di insegnamento

Elementi di Metodo Sperimentale

- Corso del primo anno della laurea triennale in Scienza e Nanotecnologia dei Materiali, Università degli Studi di Milano-Bicocca
- Supervisione e tutoraggio degli studenti nelle attività di laboratorio
- AA 2024-2025
- AA 2023-2024

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

2016 - 2019

Dottorato in Scienze dei Materiali e Nanotecnologie

Università degli Studi di Milano-Bicocca

- Tesi dal titolo "Investigating metal-organic/inorganic interfaces with different dimensionalities from first-principles" svolta presso il Dipartimento di Scienze dei Materiali. Relatore Prof. Gian Paolo Brivio, correlatore: Dott. Guido Fratesi.
- Attività di ricerca teorico-computazionale: studio ai principi primi della geometria, delle proprietà elettroniche di stato fondamentale e di possibili stati eccitati di sistemi di interesse opto-elettronico e chimico.
- Focus su superfici metalliche e interfacce con molecole organiche e non, oppure con materiali bidimensionali, ad esempio silicene e grafene.

- Partecipazione a Conferenze, Workshop e Scuole, anche a livello internazionale.
- Esperienza semestrale di ricerca all'estero come Visiting PhD student presso l'University of Central Florida (Orlando, US), in collaborazione con il gruppo del Prof. A. Kara, su interfacce metallo/silicio intercalate con materiali isolanti.

2012 - 2016

Laurea magistrale in Fisica

Università degli Studi di Milano-Bicocca

- Curriculum di studi in fisica della materia, tesi dal titolo "*Ab initio* investigation of the adsorption of aromatic molecules on a platinum surface" svolta presso il Dipartimento di Scienze dei Materiali. Relatore Prof. Gian Paolo Brivio, correlatore: Dott. Guido Fratesi, votazione 110/110 con Lode.

2003 - 2012

Laurea triennale in Fisica

Università degli Studi di Milano

- Curriculum di fisica generale, tesi dal titolo "Studio di stelle di neutroni isolate in banda X, tramite i dati del satellite XMM-Newton", svolta presso INAF-IASF CNR Milano. Relatore interno Prof. Pierre Pizzochero, relatore esterno Dott. Andrea Tiengo.

CONTRIBUTI SCIENTIFICI

Pubblicazioni

1. "Interface energies of Ga_2O_3 phases with the sapphire substrate and the phase-locked epitaxy of metastable structures explained"
Bertoni I., Ugolotti A., Scalise E., Bergamaschini R., Miglio L.
J. Mat. Chem. C 13, 1469, 2025
2. "Surface and volume energies of α -, β -, and κ - Ga_2O_3 under epitaxial strain induced by a sapphire substrate"
Bertoni I., Ugolotti A., Scalise E., Miglio L.
J. Mat. Chem. C 12, 1820, 2024
3. "CO Adsorption on a Single-Atom Catalyst Stably Embedded in Graphene"
Perilli D., Chesnyak V., Ugolotti A., Panighel M., Vigneri S., Armillotta F., Naderasli P., Stredansky M., Schied M., Lacovig P., Lizzit S., Cepek C., Comelli G., Brune H., Africh C., Di Valentin C.
Angewandte Chemie – Int. Ed. 64, 2025
4. "Light-Induced Transformation of Virus-Like Particles on TiO_2 "
Kohantorabi M., Ugolotti A., Sochor B., Roessler J., Wagstaffe M., Meinhardt A., Beck E., Dolling D., Garcia M., Creutzburg M., Keller T., Schwartzkopf M., Vayalil S., Thuenauer R., Guédez G., Löw C., Ebert G., Protzer U., Hammerschmidt W., Zeidler R., Roth S., Di Valentin C., Stierle A., Noei H.
ACS Applied Materials & Interfaces 16, 37275, 2024
5. "Insights into the active nickel centers embedded in graphitic carbon nitride for the oxygen evolution reaction"
Rossetti N., Ugolotti A., Cometto C., Celorrio V., Drazic G., Di Valentin C., Calvillo, L.
J. Mat. Chem. A 12, 6652, 2024
6. "Scalable bottom-up synthesis of Co-Ni-doped graphene"
Chesnyak V., Perilli D., Panighel M., Namar A., Markevich A., Bui T., Ugolotti A., Farooq A., Stredansky M., Kofler C., Cepek C., Comelli G., Kotakoski J., Di Valentin C., Africh C.
Science Advances 10, 1, 2024
7. "Vitamin C Affinity to TiO_2 Nanotubes: A Computational Study by Hybrid Density Functional Theory Calculations"
Ugolotti A., Dolce M., Di Valentin C.
Nanomaterials 14, 261, 2024
8. "Adsorption and Inactivation of SARS-CoV-2 on the surface of anatase $TiO_2(101)$ "
Kohantorabi M., Wagstaffe M., Creutzburg M., Ugolotti A., Kulkarni S., Jeromin A., Krekeler T., Feuerherd M., Hermann A., Ebert G., Protzer U., Guéde G., Löw C., Thuenauer R., Schlueter C., Gloskovskii A., Keller T., Di Valentin C., Stierle A., Noei H.
ACS Applied Materials and Interfaces 15, 8770, 2023
9. "In-Plane Hydrogen Bonds and Out-of-Plane Dipolar Interactions in Self-Assembled Melem Networks"
Ugolotti A., Lanzilotto V., Grazioli C., Schio L., Zamalloa-Serrano J., Stredansky M., Zhang T., de Simone M., Ferraro L., Floreano L., Coreno M., Puglia C., Di Valentin C.
J. Phys. Chem. C 127, 11307, 2023
10. "Trends in excitonic, vibrational and polaronic properties of graphitic carbon nitride polymorphs"
Ugolotti A. e Di Valentin C.
Applied Surface Science 608, 155164, 2023
11. "Ab-Initio Spectroscopic Characterization of Melem-Based Graphitic Carbon Nitride Polymorphs"
Ugolotti A. e Di Valentin C.

Nanomaterials 11, 1863, 2021

12. "Copper single-atoms embedded in 2D graphitic carbon nitride for the CO₂ reduction"
Cometto C., Ugolotti A., Grazietti E., Moretto A., Bottaro G., Di Valentin C., Calvillo L., Granozzi G.
npj 2D Materials and Applications 5,63, 2021
13. "Inside-out growth method for high-quality nitrogen-doped graphene"
Fiori S., Perilli D., Panighel M., Cepek C., Ugolotti A., Sala A., Liu H., Comelli G., Di Valentin C., Africh C.,
Carbon 171, 704, 2021
14. "Nontrivial central-atom dependence in the adsorption of M-TPP molecules (M=Co, Ni, Zn) on Fe(001)-p(1×1)O"
Fratesi G., Achilli S., Ugolotti A., Lodesani A., Picone A., Brambilla A., Floreano L., Calloni A., Bussetti G.
Applied Surface Science 530, 147085, 2020
15. "Coverage-dependent electronic and optical properties of H- and F-passivated Si/Ag(111) from first principles"
Ugolotti A., Brivio G. P., Fratesi, G.
Phys. Rev. B 101, 195413, 2020
16. "Fingerprints of sp¹ hybridized C in the near-edge X-ray absorption spectra of surface grown materials"
Fratesi G., Achilli S., Manini N., Onida G., Baby A., Ravikumar A., Ugolotti A., Brivio G. P., Milani A., Casari C. S.
Materials 11, 2556, 2018
17. "Chemisorption of pentacene on Pt(111) with little molecular distortion"
Ugolotti A., Harivyasi S. S., Baby A., Dominguez M., Pinardi A. L., López M. F., Martín-Gago J. A., Fratesi G., Floreano L., Brivio G. P.
J. Phys. Chem. C 121, 22797, 2017

Conferenze e workshop

1. Contributo orale "Interpretation of the competition between k and b phases with supersaturation in MOVPE growth of Ga₂O₃ on c-oriented sapphire", ICG Conference, Lecce, 2025
2. Contributo orale su invito "Characterization of SARS-CoV-2 adsorption on TiO₂ through ab-initio core-level spectroscopy", CORAERO summer school, sincrotrone Desy, Amburgo (DE), 2024
3. Poster dal titolo "First-principle approach to Ga₂O₃/Si and Ga₂O₃/3C-SiC interfaces", IWGO GraFOx, Berlin (DE), 2024
4. Contributo orale su invito "Structural, electronic and spectroscopic properties of graphitic carbon nitride: interplay between theory and experiments", workshop "From surfaces to devices: novel perspectives from nanostructured oxides and carbon materials", Università Cattolica del Sacro Cuore, Brescia, 2022
5. Contributo orale "Theoretical characterization of graphitic carbon nitride polymorphs: insights into the structural, electronic and spectroscopic properties", 35th ECOSS, Luxembourg, 2022
6. Contributo orale dal titolo "Graphitic carbon nitride allotropes: theoretical characterization of pristine, H-, O-, NH₂- and Cu-functionalised structures", EMRS Spring Meeting, virtuale, 2021
7. Contributo orale dal titolo "Electronic and optical properties of hydrogenated Silicene on Ag(111): a computational study", Materials.it, Bologna, 2018
8. Poster dal titolo "Hydrogenated Silicene on Ag(111): a theoretical investigation through optical excitations", 23° ETSF workshop on electronic excitations, Milano, 2018
9. Contributo orale dal titolo "Tuning the electronic properties of Silicene through half-hydrogenation or Graphene support", 6° meeting internazionale sul Silicene (IMS), Soleil Orsay (FR), 2017
10. Contributo orale dal titolo "Chemisorption of Pentacene on Pt(111) with little molecular distortion", Fismat, Trieste, 2017