

Curriculum Vitae

Luca Bertini

Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze
Università degli studi di Milano-Bicocca
luca.bertini@unimib.it



Dati Personali

Nome	Luca Bertini
Nazionalità	Italiana
Data di nascita	25 ottobre 1970
Luogo di nascita	Erba (CO)
Residenza	Via Giulio e Corrado Venini 64, 20127, Milano

Informazioni Generali

Posizione lavorativa attuale	Professore associato (tempo pieno) Settore concorsuale 03/B1 Settore Scientifico Disciplinare CHIM/03
Indirizzo	Università di Milano-Bicocca, Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze, Piazza della Scienza 2, 20126, Milano.
e-mail	luca.bertini@unimib.it
Recapiti telefonici	Ufficio: 02-64483438 Cellulare: 347-5846105
Homepage	https://www.unimib.it/luca-bertini
ORCID ID	0000-0003-3402-0846 http://orcid.org/0000-0003-3402-0846

Titoli di studio

- 1990-1996 **Laurea in chimica** presso il Dipartimento di Chimica Fisica ed elettrochimica, Università degli Studi di Milano (Marzo 1996) - Dissertazione: *Ottimizzazione di funzioni d'onda con il metodo Monte Carlo Variazionale*. Relatore: Prof. Gabriele Morosi. Voto finale: 110/110 e lode.
- 1996-1999 **Dottorato in Scienze Chimiche** presso il Dipartimento di Chimica Fisica ed elettrochimica, Università degli Studi di Milano (Ottobre 1999) - Dissertazione: *Varietà di strutture elettroniche e Metodi Monte Carlo Quantistici*. Relatore: Prof. Gabriele Morosi.

Esperienze Lavorative

- 1998-1999 **Visiting scholar** presso il laboratorio del Prof. David Ceperley e del Dr. Lubos Mitas (Marzo 1998/Aprile 1999), Università dell'Illinois presso Urbana-Champaign (Stati Uniti) per lo sviluppo di un progetto sui cluster di azoto N₈ e N₂₀.
- 2000 **Prestazione di collaborazione** per lo "Sviluppo di un programma in linguaggio Fortran per l'implementazione di forme funzionali integrali" presso il Dipartimento di Chimica Fisica ed elettrochimica, Università degli Studi di Milano (periodo 11-05-2000/31-08-2000).
- 2000-2005 **Assegno di ricerca** usufruito presso l'Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari (ISTM-CNR) di Milano nell'ambito del programma di ricerca "*Nano-Engineering of High Performance Thermoelectrics*" contratto n. G5RD-CT2000-00292 finanziato nell'ambito del V Programma Quadro della Comunità Europea attività Crescita Competitiva e Sostenibile.
- 2006 **Ricercatore confermato** a tempo indeterminato SSD CHIM/03 Chimica Generale ed Inorganica presso il Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze, Piazza della Scienza 2, Università degli studi di Milano-Bicocca.
- 2016 **Abilitazione scientifica nazionale** di seconda fascia nel Settore Concorsuale 03/B1 - Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici SSD CHIM/03 Chimica Generale ed Inorganica.
- 2019 – presente **Professore associato** a tempo indeterminato SSD CHIM/03 Chimica Generale ed Inorganica presso il Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze, Piazza della Scienza 2, Università degli studi di Milano-Bicocca.

Attività didattica presso l'Università degli studi di Milano-Bicocca

A.A.: 2006/2007	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (3 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Bioinformatica: correlazione struttura funzione Modulo 2 (4CFU) - Corso di Laurea Magistrale in Bioinformatica
A.A.: 2007/2008	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (4 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Bioinformatica: correlazione struttura funzione (8CFU) - Corso di Laurea Magistrale in Bioinformatica
A.A.: 2008/2009	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (3 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Bioinformatica: correlazione struttura funzione Modulo 2 (4CFU) - Corso di Laurea Magistrale in Bioinformatica
A.A.: 2009/2010	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (3 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Teoria dei sistemi molecolari (4CFU) - Corso di Laurea Magistrale in Bioinformatica
A.A.: 2010/2011	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (2 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Teoria dei sistemi molecolari (4CFU) - Corso di Laurea Magistrale in Bioinformatica
A.A.: 2011/2012	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (2 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Laboratorio di Chimica Generale (2CFU) - Corso di Laurea Triennale di Biologia
A.A.: 2012/2013	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (3 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di laurea triennale in Biotecnologie
A.A.: 2013/2014	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (2 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Laboratorio di Chimica Generale (2CFU) - Corso di Laurea Triennale di Biologia ● Chimica Generale (4CFU) - Corso di Laurea Triennale Ottica e Optometria
A.A.: 2014/2015	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (2 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Laboratorio di Chimica Generale (2CFU) - Corso di Laurea Triennale di Biologia
A.A.: 2015/2016	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (2 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Laboratorio di Chimica Generale (2CFU) - Corso di Laurea Triennale di Biologia ● Fotochimica (2CFU) – Corso di Laurea Magistrale Scienze e Tecnologie Chimiche

A.A.: 2016/2017	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (2 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Laboratorio di Chimica Generale (2CFU) - Corso di Laurea Triennale di Biologia ● Fotochimica (2CFU) - Corso di Laurea Magistrale Scienze e Tecnologie Chimiche
A.A.: 2017/2018	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (2 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Fotochimica (2CFU) - Corso di Laurea Magistrale Scienze e Tecnologie Chimiche
A.A.: 2018/2019	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (2 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Laboratorio di Chimica Generale (2CFU) - Corso di Laurea Triennale di Biologia ● Fotochimica (2CFU) - Corso di Laurea Magistrale Scienze e Tecnologie Chimiche
A.A.: 2019/2020	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (2 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Laboratorio di Chimica Generale (2 turni, 2CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale di Biologia ● Fotochimica (2CFU) - Corso di Laurea Magistrale Scienze e Tecnologie Chimiche
A.A.: 2020/2021	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (2 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Laboratorio di Chimica Generale (2 turni, 2CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale di Biologia ● Fotochimica (2CFU) - Corso di Laurea Magistrale Scienze e Tecnologie Chimiche ● Chimica Bioinorganica (6CFU) - Corso di Laurea Magistrale Scienze e Tecnologie Chimiche
A.A.: 2021/2022	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (2 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Laboratorio di Chimica Generale (2 turni, 2CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale di Biologia ● Fotochimica (2CFU) - Corso di Laurea Magistrale Scienze e Tecnologie Chimiche ● Chimica Bioinorganica (6CFU) - Corso di Laurea Magistrale Scienze e Tecnologie Chimiche
A.A.: 2022/2023	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (2 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Laboratorio di Chimica Generale (2 turni, 2CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale di Biologia ● Corso di Laurea Magistrale Scienze e Tecnologie Chimiche ○ Chimica Bioinorganica (6CFU) ○ Fotochimica (2CFU)

A.A.: 2023/2024	● Laboratorio di chimica generale ed inorganica (2 turni, 3CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie ● Laboratorio di Chimica Generale (2 turni, 2CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale di Biologia ● Corso di Laurea Magistrale Scienze e Tecnologie Chimiche ○ Chimica Bioinorganica (6CFU) ○ Fotochimica (2CFU)
A.A.: 2024/2025	● Chimica Fisica dei Sistemi Biologici (1CFU) ● Laboratorio di Chimica Generale (2 turni, 2CFU ciascuno) - Corso di Laurea Triennale di Biologia ● Corso di Laurea Magistrale Scienze e Tecnologie Chimiche ○ Chimica Bioinorganica (6CFU) ○ Fotochimica (2CFU)

Attività di esercitazione

1999-2005	Esercitatore di Termodinamica Chimica presso l'Università dell'Insubria - sede di Como nell'ambito del corso di Chimica Fisica I e Termodinamica chimica.
-----------	---

Supervisione studenti tesi di laurea triennale/magistrale/dottorato

2007-2008	Relatore di tesi magistrale di Valentina Barbieri in Bioinformatica dal titolo "Il legame dello ione Cu(II) nella regione N-terminale del peptide amiloide Aβ42: uno studio di modellistica molecolare classica e quantistica".
2010-2011	Relatore di tesi magistrale di Marco Romaniello in Bioinformatica dal titolo "Studio di modellistica molecolare della coordinazione del Cu ²⁺ al sito di legame con l'angiogenina".
2013-2014	Relatore di tesi magistrale di Tommaso Prosdocimi in Biotecnologie Industriali dal titolo "Reattività di modelli del complesso Cu(II)-Aβ nell'ambito della malattia di Alzheimer: studio DFT sulla produzione del radicale ossidril".
2015-2016	Relatore di tesi di laurea triennale di Francesco Angelo Bassani in Biotecnologie dal titolo "Studio computazionale mediante simulazioni di dinamica molecolare classica del meccanismo di azione degli inibitori dell'aggregazione del peptide amiloide Aβ1-40 indotta dallo ione Cu ²⁺ ".
2015-2016	Relatori di tesi di laurea triennale di Francesco Saverio Monaco in Scienze e Tecnologie chimiche dal titolo "Calcolo e analisi di spettri elettronici per modelli biomimetici del sito attivo di [FeFe]-idrogenasi."

2017-2018	Relatore di tesi magistrale esterna di Lorenzo Mannino in Biotecnologie Industriali svoltasi presso <i>Unité de Bioénergétique et Ingénierie des Protéines</i> (BIP) convenzionata con <i>l'Université d'Aix-Marseille</i> (AMU) dal titolo "Studio elettrochimico della maturazione artificiale nelle [Fe-Fe]-idrogenasi" nell'ambito della collaborazione con il laboratorio di elettrochimica di metallo-proteine del dr Christophe Leger
2016-2017	Relatore interno della tesi magistrale esterna in Biotecnologie industriali di Marco Lorenzi dal titolo " <i>The Carbon Monoxide Dehydrogenase (CODH) From Clostridium acetobutylicum</i> " svoltasi presso <i>Unité de Bioénergétique et Ingénierie des Protéines</i> del CNRS convenzionato con <i>l'Université d'Aix-Marseille</i> nell'ambito della collaborazione con il laboratorio di elettrochimica di metallo-proteine del dr Christophe Leger e del Dr Sebastien Dementin.
2017-2018	Relatore di tesi magistrale di Chiara di Carlo in Scienze Chimiche dal titolo "Reattività di modelli del complesso Cu(II)-A β nell'ambito della malattia di Alzheimer: studio DFT della riduzione del superossido a perossido di idrogeno".
2017-2018	Relatore di tesi di laurea triennale di Yassine Remadi in Biotecnologie dal titolo "La valorizzazione degli scarti ittici mediante la degradazione con l'enzima LPMO A11".
2014-2017	Co-supervisore della tesi di dottorato in scienze chimiche di Matteo Sensi svoltasi presso <i>Unité de Bioénergétique et Ingénierie des Protéines</i> convenzionata con <i>l'Université d'Aix-Marseille</i> dal titolo " <i>Reactivity and photochemistry of the active site of FeFe-hydrogenases</i> " nell'ambito della collaborazione con il laboratorio di elettrochimica di metallo-proteine del dr Christophe Leger e del Dr Sebastien Dementin.
2020-2021	Relatore di tesi magistrale di Alberto Rovetta in Biotecnologie industriali dal titolo "La reattività del radicale OH coordinato al complesso Cu(II)-A β nell'ambito della malattia di Alzheimer: modelling DFT dell'attacco radicalico alle teste polari dei fosfolipidi di membrana".
2020-2021	Relatore di tesi magistrale di Laura Carosella in Scienze Chimiche dal titolo "La reattività del radicale OH coordinato al complesso Cu(II)-A β nell'ambito della malattia di Alzheimer: modelling DFT dell'attacco radicalico alle catene alifatiche dei fosfolipidi di membrana"
2020-2021	Relatore di tesi magistrale di Vittoria Fusi in Scienze Chimiche dal titolo "Modelling DFT di Nickel porfirine ad alto spin nella catalisi di riduzione della CO ₂ "
2020-2021	Relatore di tesi magistrale di Kirollos Moukhtar Habib Gergis Fanous in Scienze Chimiche dal titolo: Studio di modelling molecolare sulla struttura e la reattività del sito catalitico della Superossido-dismutasi sostituito con Cadmio.

Partecipazione a collegi di dottorato di ricerca

2010-2013	Partecipazione al collegio di dottorato ricerca di Scienze Chimiche - Università degli Studi di Milano-Bicocca Cicli XXVI-XXVII-XXVIII- XXIX-XXX.
2014-2016	Partecipazione al collegio di dottorato di ricerca in Scienze Chimiche, Geologiche ed Ambientali - Università degli Studi di Milano-Bicocca Cicli XXX-XXXI-XXXII.
2017-presente	Membro del collegio allargato dei docenti del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche, Geologiche ed Ambientali, Università degli Studi di Milano-Bicocca.
2025	Membro del collegio dei docenti del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche, Geologiche ed Ambientali, Università degli Studi di Milano-Bicocca ciclo XLI

Incarichi istituzionali ed attività organizzative

2016	Membro della commissione giudicatrice per l'esame finale del Dottorato di ricerca in Chimica Fisica, Università degli Studi di Milano ciclo XXVIII.
2018	Membro della commissione giudicatrice del concorso di ammissione al Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche, Geologiche ed Ambientali, Università degli Studi di Milano-Bicocca Ciclo XXXIV.
2018	Membro della commissione giudicatrice per l'esame finale del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche, Università degli Studi di Napoli Federico II Ciclo XXIX.
2012-2016	Revisore MIUR per la valutazione VQR 2004-2010 e VQR 2011-2014 GEV 03.
2019-2025	Socio ordinario della <i>Society of Biological Inorganic Chemistry</i> (SBIC)
2018	Membro del comitato organizzativo della scuola internazionale "Computational spectroscopy: bridging theory and experiment" (https://cste.lakecomoschool.org/) tenutasi dal 9 and 14 settembre 2018 nell'ambito della serie delle <i>Lake Como School of Advanced Studies</i> .
2019	Componente della Commissione Paritetica per il Corso di Laurea triennale e magistrale in Scienze Biologiche, Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze, Università di Milano-Bicocca.
2022-presente	Presidente della Commissione Paritetica per Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze, Università di Milano-Bicocca.

2023

Socio ordinario della Società Chimica Italiana – Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC) e della divisione di Chimica Inorganica

Ambiti scientifici ed attuale attività di ricerca

L'ambito di ricerca del dott. Luca Bertini è quello del *modelling* computazionale di sistemi chimici atomici e molecolari utilizzando i metodi della chimica quantistica. Le tematiche attualmente sviluppate sono legate alla caratterizzazione delle proprietà e della reattività di sistemi di interesse biologico in campo bioinorganico e dei loro modelli biomimetici. Le tecniche utilizzate sono principalmente quelle legate alla *Density Functional Theory* (DFT) per le proprietà di stato fondamentale ed alla *Time-Dependent DFT* (TDDFT) per le proprietà di stato eccitato elettronico. In particolare, la ricerca è volta allo

- Studio della reattività delle laccasi fungine e batteriche verso substrati non fenolici come i composti policiclici aromatici e polietilene
- Studio delle proprietà dei modelli biomimetici binucleari del sito attivo delle [FeFe]-idrogenasi
 - nell'ambito della inibizione da CO con la caratterizzazione dei meccanismi di distacco del CO esogeno a livello DFT;
 - con possibili applicazioni in campo catalitico per la produzione di idrogeno molecolare e con particolare interesse alla caratterizzazione delle proprietà molecolari e di reattività di modelli ditiolati quali $\text{Fe}_2(\text{CO})_6(\text{S}_2\text{C}_3\text{H}_6)$, $\text{Fe}_2(\text{CO})_6(\text{S}_2\text{C}_2\text{H}_4\text{NH})$ e loro derivati;
 - con possibili applicazioni in campo fotochimico per la produzione *light-driven* di idrogeno molecolare; in particolare è stata posta l'attenzione sulla caratterizzazione della struttura elettronica e delle proprietà degli stati eccitati elettronici a livello TDDFT di diversi modelli della serie $\text{Fe}_2(\text{CO})_{4-x}\text{L}_x(\text{S}_2\text{R})$, con $\text{L}=\text{CO}$, PMe_3 , dppv, CN- e $\text{R}=(\text{CH}_2)_3$, $(\text{CH}_2\text{NHCH}_2)$, sistemi eteroaromatici di Si.
- Studio delle proprietà del sito attivo delle [FeFe]-idrogenasi con particolare riferimento
 - al processo di inibizione da CO e ione cloruro con la relativa caratterizzazione dei meccanismi e delle energetiche;
 - al processo di fotolisi di CO con la caratterizzazione del *pathway* di distacco del CO esogeno sulle superfici di potenziale degli stati eccitati di valenza coinvolti;
 - alla foto-inibizione ed ai danni da irraggiamento nel campo UV;
- Studio delle proprietà redox di modelli del peptide amiloide A β coordinato al rame divalente nell'ambito della malattia di Alzheimer
 - con interesse ai processi di produzione di *Reactive Oxygen species*, in particolare di O_2 , del radicale superossido O_2^- e del radical OH con la caratterizzazione degli intermedi rilevanti nell'ambito del modello di *electron transfer* a sfere interne Cu(II)/Cu(I) assistito dall'acido ascorbico;
 - con interesse nella propagazione del radicale OH a livello intra- ed inter-peptidico studiata sia a livello DFT che a livello classico con i metodi della dinamica molecolare;
- Studio delle proprietà catalitiche delle monossigenasi litiche dei polisaccaridi (IPMO) e del loro sito attivo contenente uno ione rame bivalente nella degradazione di biomasse recalcitranti;
- Studio del meccanismo catalitico dell'ossidazione dei tioli a disolfuri e del Br^- a HOBr da parte dell'amavadin, un cofattore di vanadio V^{V} presente in alcuni funghi;
- Studio delle proprietà dello stato fondamentale e degli stati elettronici eccitati di complessi

metallo carbonili binucleari di Fe ($\text{Fe}_2(\text{CO})_9$, $\text{Fe}_2(\text{CO})_8$ e $\text{Fe}_2(\text{CO})_6\text{S}_2$) a livello DFT e TDDFT in combinazione con l'analisi delle densità di carica mediante l'approccio dalla *Quantum Theory of Atom in molecules*;

- Studio della fluorescenza anomala delle soluzioni acquose, affrontato con un approccio integrato: sperimentale, mediante tecniche spettroscopiche di fluorescenza; teorico-computazionale, attraverso modellistica TD-DFT applicata a cluster acquosi di grandi dimensioni, finalizzata alla comprensione dell'origine microscopica dei segnali emissivi osservati.

Pubblicazioni scientifiche

ORCID: 0000-0003-3402-0846

<http://orcid.org/0000-0003-3402-0846>

Statistiche generali: Co-autore di 78 articoli pubblicati su riviste scientifiche internazionali indicizzate; di 8 atti a congressi internazionali; di 4 capitoli su monografia.

h-index: 29, citazioni totali 2578 (Scopus)

1. *Linear expansions of correlated functions: a Variational Monte Carlo case study.* Luca Bertini, Dario Bressanini, Massimo Mella, Gabriele Morosi. International Journal of Quantum Chemistry, **1999**, 74, 23-33
2. *Explicitly Correlated Trial Wave Function in Quantum Monte Carlo Calculation of excited states of Be and Be⁻.* Luca Bertini, Dario Bressanini, Massimo Mella, Gabriele Morosi. Journal of Physics B, **2001**, 34, 257-266
3. *Stability of few-body systems and Quantum Monte Carlo methods.* Luca Bertini, Dario Bressanini, Massimo Mella, Gabriele Morosi. Few Body systems, **2002**, 31, 199-204
4. *Nanostructured $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}_3$ skutterudites: synthesis, thermoelectric properties and theoretical modeling.* Luca Bertini, Christian Stiewe, Muhammed Toprak, Simon Williams, Dieter Platzek, Antje Mrotzec, Yu Zhang, Carlo Gatti, Eckhard Müller, Mamoun Muhammed, Michael Rowe. Journal of Applied Physics **2003**, 93, 438-447
5. *Chemical Information from the Source Function.* Carlo Gatti, Fausto Cargnoni, Luca Bertini. Journal of Computational Chemistry, **2003**, 24, 422-436
6. *Germanium K edge in GeO_2 polymorphs. Correlation between local coordination and electronic structure of germanium.* Luca Bertini, Paolo Ghigna, Marco Scavini and Fausto Cargnoni. Physical Chemistry Chemical Physics, **2003**, 5, 1451-1456
7. *Guest-Framework Interaction in type I inorganic Clathrates with promising thermoelectric properties: on the ionic versus neutral nature of the alkaline-Earth metal guest A in $\text{A}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ ($\text{A}=\text{Sr}, \text{Ba}$).* Carlo Gatti, Luca Bertini, Bo B. Iversen, Nick P Blake. Chemistry A European Journal , **2003**, 9 4556-4568
8. *Borromean binding in H_2 with Yukawa potential: a non-adiabatic quantum Monte Carlo study,* Luca Bertini, Massimo Mella, Dario Bressanini, Gabriele Morosi. Physical Review A, **2004**, 69, 042504

9. *Interstitial Zn atoms do the trick in Thermoelectric Zinc Antimonide, Zn_4Sb_3 . A combined Maximum Entropy Method X-Ray Electron Density and an Ab Initio Electronic Structure Study* Fausto Cargnoni, Eiji Nishibori, Philippe Rabiller, Luca Bertini, Mogens Christensen, G. J. Snyder, Carlo Gatti, Bo B. Iversen. *Chemistry A European Journal*, **2004**, 10, 3861-3870
10. *Structural Study of Fe Doped and Ni Substituted Thermoelectric Skutterudites by Combined Synchrotron and Neutron Powder Diffraction and Ab Initio Theory.* Mogens Christensen, Luca Bertini, Carlo Gatti, Muhammet Toprak, Eiji Nishibori, Mamoun Muhammed, Bo B. Iversen. *Journal of Applied Physics*, **2004**, 96, 3148-3157
11. *The local form of the source function as a fingerprint of strong and weak intra- and inter-molecular interactions.* Carlo Gatti, Luca Bertini. *Acta Crystallographica A60*, **2004**, 438-449
12. *The impact of the actual structure of a thermoelectric material on the electronic transport properties. The case of doped skutterudite systems.* Luca Bertini, Carlo Gatti. *Journal of Chemical Physics*, **2004**, 121, 8983-8989
13. *The impact of nanostructuring on the Thermal conductivity of Thermoelectric $CoSb_3$.* Muhammet Toprak, Christian Stiewe, Bertini Luca, Wen Hao Bao, Dieter Platzek, Simon Williams, Carlo Gatti, Eckhard Müller, Yu Zhang, Michael Rowe, Mamoun Muhammed. *Advanced Functional Materials*, **2004**, 14, 1189-1196
14. *Nanostructured $Co_{1-x}Ni_x(Sb_{1-y}Te_y)_3$ Skutterudites: Theoretical Modeling, Synthesis and Thermoelectric Properties.* Christian Stiewe, Luca Bertini, Muhammet Toprak, Mogens Christensen, Dieter Platzek, Simon Williams, Carlo Gatti, Eckhard Müller, Bo B. Iversen, DM. Rowe, Mamoun Muhammed. *Journal of Applied Physics*, **2005**, 97, 044317
15. *A chemical approach to the first-principles modelling of novel thermoelectric materials.* Luca Bertini, Fausto Cargnoni, Carlo Gatti; capitol in *Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano-Structured Materials*, a cura di D.M. Rowe, CRC Press, Boca Raton, **2006**, 7-1/7-10
16. *Time-Dependent Density Functional Theory Study of $Fe_2(CO)_9$ Low-Lying Electronic Excited States.* Luca Bertini, Claudio Greco, Luca De Gioia, Piercarlo Fantucci. *Journal of Physical Chemistry A*, **2006**, 110, 12900-12907
17. *Quantum Chemical investigations od reaction Paths in metalloenzymes and Biomimetic Models – The Hydrogenase case.* Luca Bertini, Maurizio Bruschi, Luca De Gioia, Piercarlo Fantucci, Claudio Greco, Giuseppe Zampella. Capitolo in *Topics In Current Chemistry,– Computational Tools and Theoretical Studies in Biology*, a cura di M. Reiher, **2007**, 268, 1-46
18. *Insights into the mechanism of electrocatalytic hydrogen evolution mediated by $Fe_2(S_2C_3H_6)(CO)_6$, the simplest functional model of Fe-only hydrogenase active site.* Claudio Greco, Luca Bertini, Giuseppe Zampella, Maurizio Bruschi, Piercarlo Fantucci, Luca De Gioia, *Inorganic Chemistry*, **2007**, 46 108-116
19. *Structure and energetics of $Fe_2(CO)_8$ singlet and triplet electronic states.* Luca Bertini, Maurizio Bruschi, Luca De Gioia, Piercarlo Fantucci. *Journal of Physical Chemistry A*, **2007**, 111, 12152-

20. *Chemical insight into electron density and wave functions: software developments and applications to crystals, molecular complexes and materials science.* Luca Bertini, Fausto Cargnoni, Carlo Gatti. Theoretical Chemistry Accounts, **2007**, 117, 847-884
21. *Electronic structure of the $\text{Co}_4\text{Sn}_6\text{Te}_6$ ternary skutterudite phase.* Luca Bertini, Simone cenedese, Physica Status Solidi-Rapid Research Letters, **2007**, 1, 244-246
22. *Calcium filled skutterudites $\text{Ca}_x\text{Co}_4\text{Sb}_{12}$: effect of the computational approach on the ab-initio modeled electronic transport properties.* Simone Cenedese, Luca Bertini, Carlo Gatti, Journal of Physics: Conference Series, **2008**, 117, 012010
23. *DFT/TDDFT Exploration of the Potential Energy Surfaces of the Ground State and Excited States of $\text{Fe}_2(\text{S}_2\text{C}_3\text{H}_6)(\text{CO})_6$: A Simple Functional Model of the [FeFe] Hydrogenase Active Site.* Luca Bertini, Claudio Greco, Luca De Gioia, Piercarlo Fantucci, Journal of Physical Chemistry A, **2009**, 113, 5657-5670
24. *Hydrogenases: Theoretical Investigations Towards Bioinspired H_2 Production and Activation.* Maurizio Bruschi, Giuseppe Zampella, Claudio Greco, Luca Bertini, Piercarlo Fantucci, Luca Gioia. Encyclopedia of Inorganic Chemistry, John Wiley & Sons, Ltd, **2009**
25. *Functionally Relevant Interplay between the Fe_4S_4 Cluster and CN^- Ligands in the Active Site of [FeFe]-Hydrogenases.* Maurizio Bruschi, Claudio Greco, Luca Bertini, Piercarlo Fantucci, Ulf Ryde, Luca De Gioia, Journal of The American Chemical Society, **2010**, 132, 4992–4993
26. *CO Affinity and Bonding Properties of [FeFe] Hydrogenase Active Site Models. A DFT Study.* Luca Bertini, Claudio Greco, Maurizio Bruschi, Piercarlo Fantucci, Luca De Gioia, Organometallics, **2010**, 29, 2013–2025
27. *On the Photochemistry of the Low-Lying Excited State of $\text{Fe}_2(\text{CO})_6\text{S}_2$. A DFT and QTAIM Investigation.* Luca Bertini, Piercarlo Fantucci, Luca De Gioia, Organometallics, **2011**, 30, 487-498
28. *CO Disrupts the Reduced H-Cluster of FeFe Hydrogenase. A Combined DFT and Protein Film Voltammetry Study.* Carole Baffert, Luca Bertini, Thomas Lautier, Claudio Greco, Kateryna Sybirna, Pierre Ezanno, Emilien Etienne, Philippe Soucaille, Patrick Bertrand, Herv Bottin, Isabelle Meynial-Salles, Luca De Gioia, Christophe Leger, Journal of The American Chemical Society, **2011**, 133, 2096–2099
29. *DFT characterization of key intermediates in thiols oxidation catalyzed by amavadin.* Bertini Luca; Barbieri Valentina; Fantucci Piercarlo; De Gioia, Luca, Zampella, Giuseppe. Dalton Transaction. **2011**, 40, 7704-7712
30. *Copper coordination to the putative cell binding site of angiogenin: a DFT investigation.* Bertini, Luca; Bruschi, Maurizio; Romaniello, Marco; Zampella, Giuseppe; Tiberti, Matteo; Barbieri, Valentina; Greco, Claudio; La Mendola, Diego; Bonomo, Raffaele P.; Fantucci, Piercarlo; De Gioia, Luca. Theor. Chem. Acc **2012**, 131, 1186

31. *Speciation of Copper–Peptide Complexes in Water Solution Using DFTB and DFT Approaches: Case of the [Cu(HGGG)(Py)] Complex.* Maurizio Bruschi, [Luca Bertini](#), Vlasta Bonačić-Koutecký, Luca De Gioia, Roland Mitrić, Giuseppe Zampella, Piercarlo Fantucci. *The Journal of Physical Chemistry B* **2012**, 116, 6250-6260
32. *Unsensitized Photochemical Hydrogen Production Catalyzed by Diiron Hydrides.* Wenguang Wang, Thomas B. Rauchfuss, [Luca Bertini](#), Giuseppe Zampella. *Journal of The American Chemical Society*, **2012**, 134, 4525–4528
33. *Excited State Properties of Diiron Dithiolate Hydrides: Implications in the Unsensitized Photocatalysis of H₂ Evolution.* [Luca Bertini](#), Piercarlo Fantucci, Luca De Gioia, Giuseppe Zampella, *Inorganic Chemistry*, **2013**, 52 9826-9841
34. *Computational Investigation on the Spectroscopic Properties of Thiophene Based Europium β -Diketonate Complexes.* Claudio Greco, Giorgio Moro, [Luca Bertini](#), Malgorzata Biczysko, Vincenzo Barone, Ugo Cosentino, *Journal of Chemical Theory and Computation* **2014**, 10, 767-777
35. *TDDFT modeling of the CO-photolysis Fe₂(S₂C₃H₆)(CO)₆, a model of the [FeFe]-hydrogenase catalytic site.* [Luca Bertini](#), Claudio Greco, Piercarlo Fantucci, Luca Gioia. *International Journal of Quantum Chemistry* **2014**, 114, 851-861
36. *Bromoperoxidase activity of amavadin dissected: a DFT investigation.* Giuseppe Zampella, [Luca Bertini](#), Luca De Gioia. *Chemical Communications* **2014**, 50, 304-307
37. *Towards biomimetic models of the reduced [FeFe]-hydrogenase that preserve the key structural features of the enzyme active site; a DFT investigation.* Sabrina Sicolo, Maurizio Bruschi, [Luca Bertini](#), Giuseppe Zampella, Giulia Filippi, Federica Arrigoni, Luca De Gioia, Claudio Greco, *International Journal of Hydrogen Energy* **2014**, 39, 18565-18573
38. *Inhibitors of the Cdc34 acidic loop: A computational investigation integrating molecular dynamics, virtual screening and docking approaches.* Alberto Arrigoni, [Luca Bertini](#), Luca De Gioia, Elena Papaleo. *FEBS open bio* **2014**, 4, 473-484
39. *Quantum Mechanical Methods for the Investigation of Metalloproteins and Related Bioinorganic Compounds.* [Luca Bertini](#), Maurizio Bruschi, Ugo Cosentino, Claudio Greco, Giorgio Moro, Giuseppe Zampella, Luca De Gioia, *Metalloproteins : Methods and Protocols* a cura di J. Fontecilla-Camps e Y. Nicolet in *Methods in Molecular Biology* Volume **2014**, 1122, pp 207-268 Humana Press (Springer)
40. *A sterically stabilized Fe^I–Fe^I semi-rotated conformation of [FeFe] hydrogenase subsite model.* Roman Goy, [Luca Bertini](#), Catherine Elleouet, Helmar Görls, Giuseppe Zampella, Jean Talarmin, Luca De Gioia, Philippe Schollhammer, Ulf-Peter Apfel, Wolfgang Weigand. *Dalton Transactions* **2015**, 44, 1690-1699
41. *Silicon–Heteroaromatic [FeFe] Hydrogenase Model Complexes: Insight into Protonation, Electrochemical Properties, and Molecular Structures.* Roman Goy, [Luca Bertini](#),

Helmar Görls, Luca De Gioia, Jean Talarmin, Giuseppe Zampella, Philippe Schollhammer, Wolfgang Weigand. *Chemistry A European Journal*, **2015**, 21 5061-5063

42. *DFT Dissection of the Reduction Step in H₂ Catalytic Production by [FeFe]-Hydrogenase-Inspired Models: Can the Bridging Hydride Become More Reactive Than the Terminal Isomer?* Giulia Filippi, Federica Arrigoni, Luca Bertini, Luca De Gioia, Giuseppe Zampella, *Inorganic Chemistry*, **2015**, 54 9529-9542
43. *On the generation of OH· radical species from H₂O₂ by Cu(I) amyloid beta peptide model complexes: a DFT investigation.* Tommaso Prosdocimi, Luca De Gioia, Giuseppe Zampella, Luca Bertini. *J. Biol. Inorg. Chem.*, **2016**, 21, 197–212
44. *Reactivity of the excited states of the H-cluster of FeFe hydrogenase: experiments and theory.* Matteo Sensi, Carole Baffert, Claudio Greco, Giorgio Caserta, Charles Gauquelin, Laure Saujet, Marc Fontecave, Souvik Roy, Vincent Artero, Philippe Soucaille, Isabelle Meynial-Salles, Hervé Bottin, Luca de Gioia, Vincent Fourmond, Christophe Léger, Luca Bertini, *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, 138, 13612–13618
45. *Photocatalytic Hydrogen Evolution Driven by [FeFe] Hydrogenase Models Tethered to Fluorene and Silafluorene Sensitizers.* Roman Goy, Luca Bertini, Helmar Görls, Luca De Gioia, Jean Talarmin, Giuseppe Zampella, Philippe Schollhammer, Wolfgang Weigand, *Chem. A Europ J.*, **2016**, 22, 1-13
46. *Photophysical Properties of S, Se and Te-Substituted Deoxyguanosines: Insight into Their Ability To Act as Chemotherapeutic Agents*, Jenny Pirillo, Gloria Mazzone, Nino Russo, Luca Bertini, *J. Chem. Inf. Model.* **2017**, 57, 234-242
47. *Photoinhibition of FeFe Hydrogenase.* Matteo Sensi, Carole Baffert, Laura Fradale, Charles Gauquelin, Philippe Soucaille, Isabelle Meynial-Salles Hervé Bottin, Luca de Gioia, Maurizio Bruschi, Vincent Fourmond, Christophe Léger, Luca Bertini. *ACS Catal.* **2017**, 7, 7378–7387
48. *Mechanistic Insight into Electrocatalytic H₂ Production by [Fe₂(CN){μ-CN(Me)₂}{μ-CO}(CO)(Cp)₂]: Effects of Dithiolate Replacement in [FeFe] Hydrogenase Models.* Federica Arrigoni, Luca Bertini, Luca De Gioia, Andrea Cingolani, Rita Mazzoni, Valerio Zanotti, Giuseppe Zampella; *Inorg. Chem.* **2017**, 56, 22, 13852-13864
49. *Catalytic Mechanism of Fungal Lytic Polysaccharide Monooxygenases Investigated by First-Principles Calculations*, Luca Bertini, Raffaella Breglia, Matteo Lambrugh, Piercarlo Fantucci, Luca De Gioia, Marco Borsari, Marco Sola, Carlo Augusto Bortolotti, Maurizio Bruschi, *Inorg. Chem.* **2018**, 57, 86–97
50. *On the photochemistry of Fe₂(edt)(CO)₄(PMe₃)₂, a [FeFe]-hydrogenase model: A DFT/TDDFT investigation* Luca Bertini, Marta Erminia Alberto, Federica Arrigoni, Jacopo Vertemara, Piercarlo Fantucci, Maurizio Bruschi, Giuseppe Zampella, Luca De Gioia, *International Journal of Quantum Chemistry* **2018**, 118 pag:e25537
51. *Towards hydrophobic carminic acid derivatives and their incorporation in polyacrylates* Luca Gabrielli, Davide Origgi, Giuseppe Zampella, Luca Bertini, Simone Bonetti, Gianfranco Vaccaro,

- 52.** *Interaction of the H-Cluster of FeFe Hydrogenase with Halides* Melisa del Barrio, Matteo Sensi, Laura Fradale, Maurizio Bruschi, Claudio Greco, Luca de Gioia, Luca Bertini, Vincent Fourmond, Christophe Léger J. Am. Chem. Soc. **2018**, 140, 5485–5492
- 53.** *Copper reduction and dioxygen activation in Cu-Amyloid Beta peptide complexes. Insight from molecular modelling* Federica Arrigoni, Tommaso Prosdocimi, Luca Mollica, Luca De Gioia, Giuseppe Zampella, Luca Bertini, Metallomics, **2018**, 10, 1618-1630
- 54.** *H₂ Activation in [FeFe]-Hydrogenase Cofactor Versus Diiron Dithiolate Models: Factors Underlying the Catalytic Success of Nature and Implications for an Improved Biomimicry*; Federica Arrigoni, Luca Bertini, Maurizio Bruschi, Claudio Greco, Luca De Gioia, Giuseppe Zampella; Chem. Eur. J. **2019**, 25, 1227–1241
- 55.** *Anomalous Intrinsic Fluorescence of HCl and NaOH Aqueous Solutions*; Anna Maria Villa, Silvia Maria Doglia, Luca De Gioia, Luca Bertini, Antonino Natalello J. Phys. Chem. Lett. **2019**, 10, 7230–7236
- 56.** *On the importance of cyanide in diiron bridging carbyne complexes, unconventional [FeFe]-hydrogenase mimics without dithiolate: An electrochemical and DFT investigation*; Federica Arrigoni, Luca Bertini Luca De Gioia Giuseppe Zampella, Rita Mazzoni, Andrea Cingolani, Isacco Gualandi, Domenica Tonelli, Valerio Zanotti, Inorganica Chimica Acta, **2020**, 510, Article number 119745
- 57.** *Catalytic H₂ Evolution/Oxidation in [FeFe]-hydrogenase biomimetics: account from DFT on the interplay of related issues and proposed solutions*; Federica Arrigoni, Luca Bertini, Raffaella Breglia, Claudio Greco, Luca De Gioia, Giuseppe Zampella, New Journal of Chemistry **2020**, 44, 17596-17615
- 58.** *Rational design of Fe₂(μ-PR₂)₂(L)₆ coordination compounds featuring tailored potential inversion*, Federica Arrigoni, Fabio Rizza, Jacopo Vertemara, Raffaella Breglia, Claudio Greco, Luca Bertini, Giuseppe Zampella, Luca De Gioia, Chem. Phys. Chem **2020**, 21, 2279-2292
- 59.** *On the propagation of the OH radical produced by Cu-Amyloid Beta peptide model complexes. Insight from molecular modelling*, Federica Arrigoni, Fabio Rizza, Renata Tisi, Luca De Gioia, Giuseppe Zampella, Luca Bertini, Metallomics **2020**, 12, 1765-1780
- 60.** *The Photochemistry of Fe₂(S₂C₃H₆)(CO)₆(μ-CO) and Its Oxidized Form, Two Simple [FeFe]-Hydrogenase CO-Inhibited Models. A DFT and TDDFT. Investigation*, Federica Arrigoni, Giuseppe Zampella, Luca De Gioia, Claudio Greco, Luca Bertini, Inorganics **2021**, 9, 16
- 61.** *Proton Shuttle Mediated by (SCH₂)₂P=O Moiety in [FeFe]-Hydrogenase Mimics: Electrochemical and DFT Studies*. Laith R. Almazahreh, Federica Arrigoni, Hassan Abul-Futouh, Mohammad El-khateeb, Helmar Görls, Catherine Elleouet, Philippe Schollhammer, Luca Bertini, Luca De Gioia, Manfred Rudolph, Giuseppe Zampella, and Wolfgang Weigand, ACS catalysis **2021**, 11, 7080-7098

62. *Photochemistry and photoinhibition of the H-cluster of FeFe hydrogenases*, Matteo Sensi, Carole Baffert, Vincent Fourmond, Luca de Gioia, [Luca Bertini](#), Christophe Leger, *Sustainable Energy Fuels*, **2021**, 5, 4248-4260
63. *Mechanism of Hydrogen Sulfide-Dependent Inhibition of FeFe Hydrogenase*, Christina Felbek, Federica Arrigoni, David de Sancho, Aurore Jacq-Bailly, Robert B. Best, Vincent Fourmond, [Luca Bertini](#), Christophe Léger, *ACS Catalysis* **2021**, 11, 15162-15176
64. *Investigations of the electronic-molecular structure of bio-inorganic systems using modern methods of quantum chemistry*, Federica Arrigoni, Anna Rovalletti, Luca Bertini, Raffaella Breglia, Luca De Gioia, Claudio Greco, Jacopo Vertemara, Giuseppe Zampella, Piercarlo Fantucci, *Inorganica Chimica Acta*, **2022**, 532, 120728
65. *Superoxide Reduction by Cu-Amyloid Beta Peptide Complexes: A Density Functional Theory Study*. Federica Arrigoni, Chiara Di Carlo, Alberto Rovetta, Luca De Gioia, Giuseppe Zampella, Luca Bertini *Eur. J. Inorg. Chem.* **2022**, e202200245.
66. *Fluorescence of KCl Aqueous Solution: A Possible Spectroscopic Signature of Nucleation*, Annamaria Villa, Silvia Doglia, Luca De Gioia, Antonino Natalello, Luca Bertini, *The Journal of Physical Chemistry B*, **2022** 126 (13), 2564-2572
67. *Toward Diiron Dithiolato Biomimetics with Rotated Conformation of the [FeFe]-Hydrogenase Active Site: A DFT Case Study on Electron-Rich, Isocyanide-Based Scaffolds*, Federica Arrigoni, Fabio Rizza, Luca Bertini, Luca De Gioia, Giuseppe Zampella, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2022**, e202200153.
68. *Conjugation of gold nanoparticles with multidentate surfactants for enhanced stability and biological properties*, Rany Rotem, Marco Giustra, Federica Arrigoni, Jessica A Bertolini, Stefania Garbujo, Maria A Rizzuto, Lucia Salvioni, Linda Barbieri, [Luca Bertini](#), Luca De Gioia, Miriam Colombo, Davide Prosperi *J. Mater. Chem. B*, **2023**, 11, 61–71
69. *A De Novo-Designed Type 3 Copper Protein Tunes Catechol Substrate Recognition and Reactivity*, Pirro, F., Salvatore La Gatta, Federica Arrigoni, Famulari, A., Maglio, O., Del Vecchio, P., Chiesa, M., Luca De Gioia, Luca Bertini, Marco Chino, Flavia Nastri, Angela Lombardi, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, 62, e202211552; *Angew. Chem.* **2023**, 135, e202211552.
70. Anna Rovalletti; Luca De Gioia; Piercarlo Fantucci, Claudio Greco, Jacopo Vertemara; Giuseppe Zampella, Federica Arrigoni, Luca Bertini, *Recent Theoretical Insights into the Oxidative Degradation of Biopolymers and Plastics by Metalloenzymes*. *Int. J. Mol. Sci.* **2023**, 24, 6368.
71. *Oxidation of Phospholipids by OH Radical Coordinated to Copper Amyloid- β Peptide—A Density Functional Theory Modeling*. Alberto Rovetta, Laura Carosella, Federica Arrigoni, Jacopo Vertemara, Luca De Gioia, Giuseppe Zampella, Luca Bertini *Inorganics*. **2023**, 11, 227
72. *Oxidative degradation of polyethylene by two novel laccase-like multicopper oxidases from *Rhodococcus opacus* R7*. Jessica Zampolli, Marco Mangiagalli, Daniele Vezzini, Marina Lasagni, Diletta Ami, Antonino Natalello, Federica Arrigoni, [Luca Bertini](#), Marina Lotti, Patrizia Di Gennaro *Environmental Technology & Innovation*, **2023**, 32, 103273

73. *Assessing the Performance of Non-Equilibrium Thermodynamic Integration in Flavodoxin Redox Potential Estimation*, Giuseppe Silvestri, Federica Arrigoni, Francesca Persico, Luca Bertini, Giuseppe Zampella, Luca De Gioia, Jacopo Vertemara, *Molecules* **2023**, 28, 6016
74. *Mechanism of non-phenolic substrate oxidation by the fungal laccase Type 1 copper site from *Trametes versicolor*: the case of benzo[a]pyrene and anthracene*, Orlando Carla , Rizzo Isabella Cecilia, Arrigoni, Federica, Zampolli, Jessica, Mangiagalli, Marco, Di Gennaro, Patrizia, Lotti, Marina, De Gioia, Luca, Marino, Tiziana, Greco, Claudio; Luca Bertini, *Dalton Transactions*, **2024**, 53, 12152 – 12161
75. *A conserved acidic residue drives thyroxine synthesis within thyroglobulin and other protein precursors*, Stejskalova C., Arrigoni F., Albanesi R., Bertini L., Mollica L., Coscia F., *Journal of Biological Chemistry*, **2025**, 301,108026
76. *Comparative analysis of Polyethylene-Degrading Laccases: Redox Properties and Enzyme-Polyethylene Interaction Mechanism*. *ChemSusChem* e202402253, **2025** Carla Orlando, Marzia Bellei, Jessica Zampolli, Marco Mangiagalli, Patrizia Di Gennaro, Marina Lotti, Luca De Gioia, Tiziana Marino, Giulia Di Rocco, Claudio Greco, Federica Arrigoni, Luca Bertini
77. *Anomalous Water Fluorescence Induced by Solutes*, Villa, Anna Maria, Di Paola, Jessica, Ami, Diletta, De Gioia, Luca, Natalello, Antonino, Bertini, Luca, **2025**, 16, 6935–6945, *The Journal of Physical Chemistry Letters*
78. G. Silvestri, M.P. Fossati, F. Arrigoni, L. Bertini, G. Zampella, L. De Gioia, J. Vertemara. Solvent-Driven Modulation of Shuttling Dynamics in an Autonomous Chemically Fueled Information Ratchet. *The Journal of Physical Chemistry B*, 129, 43, 11283-11296, **2025**

Atti di convegno indicizzati

1. *Thermoelectric properties of nano-grained CoSb₃ skutterudites doped with Ni and Te*, Bertini, L., Billquist, K., Christensen, M., Gatti, C., Holmgren, L., Iversen, B., Mueller, E., Muhammed, M., Noriega, G., Palmqvist, A., Platzek, D., Rowe, D.M., Saramat, A., Stiewe, C., Toprak, M., Williams, S.G., Zhang, Y. 2003 International Conference on Thermoelectrics, ICT, Proceedings, **2003**, 1287446, pp. 48-51.
2. *Pitfalls in crystallographic analysis of doped skutterudite materials* Bertini, L., Billquist, K., Christensen, M., Gatti, C., Holmgren, L., Iversen, B., Mueller, E., Muhammed, M., Noriega, G., Palmqvist, A., Platzek, D., Rowe, D.M., Saramat, A., Stiewe, C., Toprak, M., Williams, S.G., Zhang, Y. 2003 International Conference on Thermoelectrics, ICT, Proceedings, **2003**, 1287451, pp. 68-71.
3. *Theoretical modeling of Te doped CoSb₃*, Bertini, L., Billquist, K., Christensen, M., Gatti, C., Holmgren, L., Iversen, B., Mueller, E., Muhammed, M., Noriega, G., Palmqvist, A., Platzek, D., Rowe, D.M., Saramat, A., Stiewe, C., Toprak, M., Williams, S.G., Zhang, Y. 2003 International

Conference on Thermoelectrics, ICT, Proceedings, **2003**, 1287455, pp. 85-88.

4. *Grain size dependence of transport properties of nano-engineered thermoelectric CoSb₃*. Bertini, L., Billquist, K., Christensen, M., Gatti, C., Holmgren, L., Iversen, B., Mueller, E., Muhammed, M., Noriega, G., Palmqvist, A., Platzek, D., Rowe, D.M., Saramat, A., Stiewe, C., Toprak, M., Williams, S.G., Zhang, Y. 2003 International Conference on Thermoelectrics, ICT, Proceedings, **2003**, 1287457, pp. 93-96.
5. *Standardisation in thermoelectric transport properties measurements - The Cardiff NEDO laboratories and DLR Cologne program*. Bertini, L., Billquist, K., Christensen, M., Gatti, C., Holmgren, L., Iversen, B., Mueller, E., Muhammed, M., Noriega, G., Palmqvist, A., Platzek, D., Rowe, D.M., Saramat, A., Stiewe, C., Toprak, M., Williams, S.G.K., Zhang, Y. 2003 International Conference on Thermoelectrics, ICT, Proceedings, **2003**, 1287568, pp. 532-536.
6. *Chemical alloying and characterization of nanocrystalline Co_{1-x}Ni_xSb_{3-y}Te_y skutterudites*. Bertini, L., Borot, G., Billquist, K., Christensen, M., Gatti, C., Holmgren, L., Iversen, B., Mueller, E., Muhammed, M., Noriega, G., Palmqvist, A., Platzek, D., Rowe, D.M., Saramat, A., Stiewe, C., Toprak, M., Williams, S.G., Zhang, Y. 2003 International Conference on Thermoelectrics, ICT, Proceedings, **2003**, 1287463, pp. 117-120.
7. *Thermoelectric performance of large single crystal clathrate Ba₈Ga₁₆Ge₃₀*. Bertini, L., Billquist, K., Bryan, D., Christensen, M., Gatti, C., Holmgren, L., Iversen, B.B., Mueller, E., Muhammed, M., Noriega, G., Palmqvist, A.E.C., Platzek, D., Rowe, D.M., Saramat, A., Stiewe, C., Stucky, G.D., Svensson, G., Toprak, M., Williams, S.G.K., Zhang, Y. 2003 International Conference on Thermoelectrics, ICT, Proceedings, **2003**, 1287465, pp. 127-130.
8. Carlo Gatti, Luca Bertini, Bo. B. Iversen, Nick. P. Blake; *On the ionic Vs. neutral nature of the metal guest in the Thermoelectric clathrate materials*, Acta Crystallographica A58 (supplement) C351, **2002**

Partecipazione a scuole e congressi

Scuole

1. Partecipazione alla scuola "Quantum Monte Carlo methods in physics and chemistry" – NATO ASI series - advance Study institute – Ithaca 12-24 luglio **1998**
2. Partecipazione al minicorso didattico "Metodi sperimentali e teorici di determinazione della densità elettronica" organizzato dalla Associazione Italiana di Cristallografia, Università di Parma, 18 Settembre **2001**.
3. Partecipazione alla scuola "Ab-initio modeling in solid state chemistry MSSC 2001" 11-15 Settembre **2001** Torino (Italy)

Partecipazione a congressi nazionali ed internazionali in qualità di relatore

1. APS march meeting **1999**, 20-26 marzo 1999 Atlanta (US)– presentazione orale "Electronic Structure of High Energy Storage Cage Molecules of Nitrogen" (<http://flux.aps.org/meetings/YR99/CENT99/abs/S6215007.html>)

2. XXII International conference on Thermoelectrics ITC **2003** 17-21 Agosto Montpellier - presentazione orale *"Theoretical modelling of Te doped CoSb₃"*.
3. 10th International Hydrogenase conference H2ase **2013** Szeged (Hungary) 8-12 luglio 2013 - Presentazione Orale *"Excited state properties and photochemistry in [FeFe] hydrogenase research area. The Time-Dependent Density Functional Theory theoretical picture."*
4. EuCOMC XXI 5-9 luglio **2015** Bratislava (Slovak) - European Conference of Organometallic Chemistry – Presentazione Orale *"Excited state properties of a [FeFe] hydrogenase active site models. The Time-Dependent Density Functional Theory theoretical picture."*
5. EuroBIC 13 - 13th European Biological Inorganic Chemistry (Budapest – Hungary 28 Agosto – 1 settembre **2016**). Presentazione Orale *"Redox properties of human and murine Copper–Amyloid Peptide Complexes. A computational insight of the OH radicals production"*
6. ISABC 14 - 14th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry (7-10 giugno **2017**, Toulouse, France). Presentazione Orale *"Redox reactivity of Copper–Amyloid peptide complexes toward ROS production. A computational insight on the redox competent metal coordination in O₂ and H₂O₂ reduction"*
7. CuBICS 2018 – The Copper Bioinorganic Chemistry Symposiums (21-24 maggio **2018**, Marseille, France). Presentazione Orale *"ROS mechanism production in Cu–Amyloid Beta peptide model complexes. The molecular modelling point of view"*
8. QBIC-V- Quantum Bio-Inorganic Chemistry Conference – Marseille (France) from the 8-10 giugno **2019**. Invited lecture *"On the propagation of the OH radical produced by Cu(II)–Aβ(1-16). The intramolecular Aβ oxidation processes from the molecular modelling point of view"*
9. ICBIC19- 19th International Conference on Biological Inorganic Chemistry – Interlaken (Svizzera) Agosto 11-16, **2019** Presentazione orale: *"On the propagation of the OH radical produced by Cu(II) Aβ(1-16). The intramolecular Aβ oxidation processes from the molecular modelling point of view"*
10. EuroBIC16-16th European Biological Inorganic Chemistry **2022** (Grenoble. 17-21 luglio). presentazione orale: *Membrane damages induced by Cu(II)–Aβ–OH radical species. OH propagation toward polar head groups and lipid tails of membrane phospholipid bilayers at DFT level.*
11. QBIC VI - 6th Quantum Bio-Inorganic Chemistry Conference **2023** (28 agosto-2 settembre Varsavia, Polonia). Presentazione orale: *Differences and similarities between fungal and bacterial laccases in oxidation of polycyclic aromatic hydrocarbon.*
12. ICBIC 21 - 21st International Conference on Biological Inorganic Chemistry **2025** (28 luglio – 1 August , 2025), Long Beach Convention Centre, Long Beach, California, USA. Presentazione orale: *"Computational Investigation of Oxidative Enzymes for Plastic and Biopolymer Degradation"*

Partecipazione a congressi nazionali ed internazionali

1. Partecipazione al "X International conference of quantum chemistry" Menton 5-10 giugno **2000** (France) - poster *"High energy storage cage molecules of Nitrogen"*
2. Gordon Conference 4-9 luglio **2004** Mount Holyoke College – South Hadley, Ma (US) - poster *"Chemical approach to the ab-initio modelling of thermoelectric material. The case of the skutterudite Co₄Sn_{6-x}Te_x. Just description or also prediction?"*
3. XX International congress of the Union of Crystallography - UICr congress 23-31 Agosto **2005** Firenze– Poster *"Ab-initio modelling of electronic transport properties: a structural informer"*
4. 9th International Hydrogenase conference H2ase **2010** Uppsala (Sweden) 27 giugno – 2 luglio 2010 – Poster *"Insights on the CO-photolysis of the CO-inhibited form of the [FeFe] hydrogenase catalytic site"*

5. DCTC13 – Congresso della divisione di Chimica Teorica e computazionale della Società Italiana di Chimica Padova 20-22 Febbraio **2013** – Poster “*Functional effects on the TDDFT investigations in organometallic photochemistry*”;
6. Partecipazione al ICH2019 - 12th International Hydrogenase Conference - Lisbon (Portugal) dal 31 marzo 4 aprile **2019**
7. Partecipazione al XXVIII National Congress of the Società Chimica Italiana con un poster dal titolo “*C-H bond activation in laccases investigated with molecular modelling*” Milano 26-30 agosto **2024**

Partecipazione a comitati organizzatori di convegni a livello nazionale o internazionale

2018	Membro del comitato organizzatore della scuola di chimica computazionale “ <i>Computational spectroscopy: bridging theory and experiment</i> ” nell’ambito della serie delle <i>Lake Como School of Advanced Studies</i> , 9-14 Settembre 2018, Villa del Grumello Como (Italia)
2019	Membro del comitato organizzatore di “ <i>HorizonChem 2019 - La Tavola Periodica degli Elementi: Storia, Innovazione e Sfide future</i> ” - giornata di approfondimento per i 150 anni della tavola periodica, 5 Aprile 2019, Aula Magna dell’Università degli Studi di Milano-Bicocca.

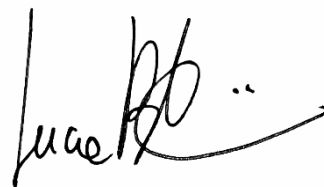
Partecipazione a progetti di ricerca a livello nazionale o internazionale

2000	Partecipazione al Programma di ricerca NANOTHERMEL - <i>Nano-engineering of high performance thermoelectrics</i> (Project ID: G5RD-CT-2000-00292) finanziato dalla comunità europea nell'ambito del quinto programma quadro (FP5-GROWTH), in collaborazione con il Dr. Carlo Gatti e presso l'Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari (ISTM-CNR) di Milano.
2008	Partecipante al Programma di ricerca Prin2008 – Coordinatore Scientifico del progetto: Prof. Ziche Marina – Durata del progetto: 24 mesi – Titolo del progetto: Modellistica molecolare delle interazioni di ioni rame o ligandi con proteine coinvolte nei processi di angiogenesi. Protocollo: 200875WHMR_005
2011	Partecipante al Programma di ricerca Prin2010-2011, Coordinatore scientifico del progetto Prof. Bonomo Raffaele Pietro - Durata del progetto: 36 mesi – Titolo del progetto: Ioni Metallici nelle Patologie da Invecchiamento: <i>Interplay</i> tra Metallostasi e Proteostasi nella Neurodegenerazione. Protocollo:2010M2JARJ_010
2017	Fondo per il finanziamento MIUR delle attività base di ricerca

- 2020 Partecipante al Programma di ricerca Prin2020, Coordinatore scientifico del progetto Prof. Angela Lombardo - Durata del progetto: 36 mesi – Titolo del progetto: **SEAfood WAsTe** *Valorization by oxidative metalloEnzymes* (SEA-WAVE). Protocollo:2020BKK3W9
- 2022 Partecipante al programma di ricerca Prin PNRR 2022 Coordinatore scientifico Dr. Federica Arrigoni – Durata del progetto 24 mesi – Titolo del progetto **SMARFeS**: Small Molecule Activation by Redesigned iron-sulfur (FeS) proteins, Protocollo
- Partecipante al programma di ricerca Prin 2022 Coordinatore scientifico Prof. Francesca Valetti (Università di Torino) – Durata 24 mesi – Titolo: Molecular determinants of Oxygen Resistance in a unique [FeFe]-hydrogenase (**MORF**)

Le dichiarazioni rese nel presente curriculum sono da ritenersi rilasciate ai sensi degli artt. 46 e 47 del D.P.R. 445/2000

Milano 24/02/2026

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Luca R.' followed by a stylized flourish.