

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n. 1 posto di Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24, comma 3, lettera a) della Legge 240/2010 per il settore concorsuale 02/B2 - Fisica Teorica della Materia, settore scientifico-disciplinare FIS/03 - Fisica della Materia, presso il Dipartimento di FISICA, (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 14 del 21/02/2023) Codice concorso 5234

Elena Molteni
CURRICULUM VITAE

(N.B. IL CURRICULUM NON DEVE ECCEDERE LE 30 PAGINE E DEVE CONTENERE GLI ELEMENTI CHE IL CANDIDATO RITIENE UTILI AI FINI DELLA VALUTAZIONE.

LE VOCI INSERITE NEL FACSIMILE SONO A TITOLO PURAMENTE ESEMPLIFICATIVO E POSSONO ESSERE SOSTITUITE, MODIFICATE O INTEGRATE

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

COGNOME	MOLTENI
NOME	ELENA
DATA DI NASCITA	14/04/1972

TITOLI

TITOLO DI STUDIO

(indicare la Laurea conseguita inserendo titolo, Ateneo, data di conseguimento, ecc.)

Laurea in Fisica (vecchio ordinamento), conseguita il 27/11/1996 presso l'Università degli Studi di Milano, con tesi "Calcolo della fase di Berry in sistemi disordinati con campi magnetici intensi", voto: 110/110 e lode

TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA O EQUIVALENTI, OVVERO, PER I SETTORI INTERESSATI, DEL DIPLOMA DI SPECIALIZZAZIONE MEDICA O EQUIVALENTE, CONSEGUITO IN ITALIA O ALL'ESTERO

(inserire titolo, ente, data di conseguimento, ecc.)

Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche, conseguito il 20/12/2001 presso l'Università degli Studi di Firenze, con tesi "Simulations of protein structure and mobility"

CONTRATTI DI RICERCA, ASSEGNI DI RICERCA O EQUIVALENTI

(per ciascun contratto stipulato, inserire università/ente, data di inizio e fine, ecc.)

- Assegno di ricerca (legge 240/2010) "Theoretical development of hybrid organic/antiferromagnetic interfaces", Università degli Studi di Milano, 01/04/2022 - 31/03/2024
- Assegno di ricerca (legge 240/2010) "Sviluppo di teoria e metodi numerici e simulazioni di principi primi di molecole biologiche eccitate mediante l'azione di radiazione nell'ultravioletto profondo", ISM - CNR, 01/06/2020 - 31/03/2022
- Borsa di ricerca "Proprietà ottiche teoriche di stacking molecolari di eumelanina: il ruolo del disordine chimico", Università degli Studi di Cagliari, 25/01/2018 - 24/04/2018
- Borsa di ricerca "Proprietà ottiche di aggregati di molecole di eumelanina", Università degli Studi di Cagliari, 20/03/2017 - 19/06/2017
- Co.Co.Co. "Interfacciamento di codici di calcolo ab initio con codici per la propagazione del campo elettromagnetico a elementi finiti", Università degli Studi di Milano, 01/09/2016 - 31/01/2017
- Borsa di ricerca "Proprietà ottiche teoriche di molecole di interesse biologico e farmacologico", Università degli Studi di Cagliari, 16/06/2016 - 15/07/2016
- Borsa di ricerca "Proprietà strutturali e di eccitazione elettronica di molecole di interesse astrofisico", OAC - Osservatorio Astronomico di Cagliari, 22/12/2015 - 21/03/2016
- Borsa di ricerca "Proprietà di eccitazione elettronica ed ottiche teoriche di molecole di interesse biologico", Università degli Studi di Cagliari, 23/03/2015 - 22/05/2015
- Borsa di ricerca "Proprietà di eccitazione elettronica ed ottiche teoriche di molecole di interesse biologico su superfici di semiconduttore", Università degli Studi di Cagliari, 17/11/2014 - 16/03/2015
- Collaborazione occasionale "First principles study of the optical properties of amino acids", Università degli Studi di Milano, 25/06/2014 - 24/08/2014
- Assegno di ricerca (legge 240/2010) "Dicroismo circolare di biomolecole: oltre l'approssimazione di particelle indipendenti", Università degli Studi di Milano, 01/01/2013 - 31/12/2013
- Collaborazione occasionale "Development and debugging of a Fortran90 code for the calculation of circular dichroism spectra", Università degli Studi di Milano, 11/06/2012 - 10/08/2012
- Assegno di ricerca (legge 449/97): "Calcolo degli spettri di dicroismo circolare di biomolecole", Università degli Studi di Milano, 01/08/2010 - 31/07/2011
- Co.Co.Co. "Calcolo degli spettri di dicroismo circolare di biomolecole", Università degli Studi di Milano, 16/12/2009 - 15/07/2010

ATTIVITÀ DIDATTICA A LIVELLO UNIVERSITARIO IN ITALIA O ALL'ESTERO

(inserire anno accademico, ateneo, corso laurea, numero ore, ecc.)

- 2010 - 2023, Università degli Studi di Milano, corso di laurea in Fisica, art.47, poi art.45: esercitazioni / esami / tutorato per il corso di Struttura della Materia 1
- a.a. 2019-2020, secondo semestre, Politecnico di Milano, Dipartimento di Fisica, esercitazioni per il corso di FONDAMENTI DI FISICA SPERIMENTALE I E B (INTEGR.), 48 ore
- a.a. 2019-2020, secondo semestre, corso di laurea in Scienze e Tecnologie Alimentari, art.45 per il corso di Elementi di Fisica, 15 ore

ATTIVITÀ DI RICERCA

01/04/2022 - (Dip. Fisica, Univ. degli Studi di Milano): Assegno di ricerca biennale "Theoretical development of hybrid organic/antiferromagnetic interfaces": Caratterizzazione, mediante metodi da principi primi (DFT), delle possibili configurazioni di adsorbimento di molecole organiche su substrati magnetici, e delle loro proprietà elettroniche, magnetiche e spettroscopiche, collaborando con i partners sperimentali del progetto EU-FET-OPEN SINFONIA per l'interpretazione dei risultati sperimentali

01/06/2020- 31/03/2022 (ISM - CNR): Assegno di Ricerca sulla tematica: "Sviluppo di teoria e metodi numerici e simulazioni di principi primi di molecole biologiche eccitate mediante l'azione di radiazione nell'ultravioletto profondo": implementazione del calcolo del dicroismo circolare (CD), a livello Independent Particle (IP) e poi beyond IP (TDDFT, BSE), nel codice Yambo; Calcolo da principi primi, mediante metodi DFT/TDDFT/BSE, delle proprietà elettroniche e degli spettri di assorbimento e CD di alcuni ciclo-dipeptidi.

2014-2019 (Univ. degli Studi di Milano, Univ. degli Studi di Cagliari): Calcolo da principi primi, mediante metodi DFT/TDDFT in onde piane: 1) delle proprietà ottiche di alcune protomolecole dell'eumelanina, sia isolate, sia stacked, sia adsorbite su superfici di Si(001); 2) delle proprietà strutturali, elettroniche ed ottiche (in particolare spettri di assorbimento e di reflectance anisotropy) di nucleobasi pirimidiniche sia isolate sia adsorbite su superfici di silicio(001): effetto di sostituzioni chimiche e della geometria di adsorbimento su tali proprietà.

2009-2014 (Univ. degli Studi di Milano): 1) Calcolo da principi primi, mediante metodi DFT, delle proprietà ottiche, in particolare degli spettri di assorbimento, di piccole biomolecole (amminoacidi e peptidi); 2) Implementazione di un codice in Fortran per il calcolo degli spettri di dicroismo circolare da principi primi, e sua applicazione ad amminoacidi e peptidi.

2002-2009 (Univ. degli Studi di Siena): Studio, mediante simulazioni di dinamica molecolare classica a complemento di esperimenti di risonanza magnetica nucleare, della struttura, interazione con metalli o con piccole molecole, di proteine, peptidi e altre molecole di interesse biologico e in alcuni casi farmacologico (peptidi coinvolti in malattie neurodegenerative, antibiotici).

1998-2001 (Dottorato di Ricerca, Università degli Studi di Firenze): Simulazioni di dinamica molecolare classica su proteine contenenti ioni metallici nel sito attivo e coinvolte in patologie neurodegenerative; studio mediante metodi bioinformatici di una famiglia di proteine coinvolte nel trasporto e omeostasi di metalli.

Competenze nell'uso di metodi e codici di simulazione numerica in fisica della materia condensata:

- Metodi *ab initio* (DFT/TDDFT, GW, BSE); simulazioni di dinamica molecolare classica.
- Uso dei seguenti codici: DFT: QuantumEspresso, Yambo, MolGW, Abinit; dinamica molecolare classica: Gromacs
- Implementazione di un codice in Fortran per il calcolo degli spettri di dicroismo circolare nell'ambito della DFT
- Implementazione del calcolo del dicroismo circolare in Yambo

Competenze informatiche generali:

- Linguaggi di programmazione: buona conoscenza del Fortran; conoscenza di base del C
- uso dei sistemi operativi Linux/UNIX e Windows

Corsi / scuole / workshops seguiti:

- 9-11/11/2022: "Advanced Quantum ESPRESSO tutorial: Hubbard and Koopmans functionals from linear response", online tutorial
- 5-7/10, 12-14/10, 19-20/10 /2022 "Machine Learning & Materials Design", Dip. Fisica, Università degli Studi di Milano
- 21-22/02/2019 - "Tutorial sulla infrastruttura di calcolo AMICO (Apparato Milanese per il Calcolo Opportunistico)", Dip. Fisica, Università degli Studi di Milano
- 13-17/05/2013 - "Theoretical Spectroscopy Lectures", CECAM, Losanna
- 22-23/04/2013 - "Introduction to C Programming Language for Scientific Applications", CINECA, Segrate (MI)
- 23/01/2013 - "Introduction to the FERMI Blue Gene/Q, for users and developers", CINECA, Segrate (MI)
- 29 e 31/05/2012 - "Comunicare al pubblico la scienza e la tecnologia", Dip. Fisica, Università degli Studi di Milano
- 16-18/03/2010 - "Il Fortran per il calcolo scientifico intensivo", CILEA, Segrate (MI)
- 25-29/09/2006 - Computational Chemistry School, Univ. degli Studi di Siena
- 02/2003 - Programming in Excel using Visual Basics for Applications, Univ. degli Studi di Siena
- 09-14/09/2001 - Advanced Computing in NMR Spectroscopy, CERM, Sesto Fiorentino (FI)
- 18-25/09/1999 - Advanced computing in NMR Spectroscopy, CERM, Sesto Fiorentino (FI)

Partecipazione a progetti

Da 04/2022: Assegno di ricerca su fondi del progetto EU-FET-OPEN SINFONIA
 2014 - 2015: ETSF (www.etsf.eu) scientist in charge dello user project n. 547 "Ab initio circular dichroism and conformational flexibility of amino acids";
 2012-2013: ETSF scientist in charge dello user project n. 446 "Ab initio calculation of circular dichroism spectra for biological molecules";
 dal 2010: partecipazione al network ETSF;

2010 – 2020: Principal Investigator nei seguenti progetti CINECA
 (<http://www.hpc.cineca.it/services/iscra>) per l'accesso a risorse di supercalcolo:
 IsCaO_PentaNiO (ISCRA C) "Pentacene on Nickel oxide"

uMI19_FisMol (convenzione CINECA - UNIMI)
 IsC77_AbRASTeS (ISCRA C) "Absorption spectra and RAS of eumelanin Tetramers on Silicon"
 IsC64_EuTetraS (ISCRA C) "Eumelanin tetrameric protomolecules adsorbed on the Si(001) surface"
 IsC58_ChemDEum (ISCRA C) "Chemical disorder in eumelanin protomolecules"
 IsC49_OproStEu (ISCRA C) "Optical properties of stacked eumelanin protomolecules"
 IsC38_OptNclSi (ISCRA C) "Optical properties of uracil-like nucleobases adsorbed on silicon(001)"
 IsC27_PrebSurf (ISCRA C) "Prebiotic molecules adsorbed on surfaces"
 IsC12_CDSBiT (ISCRA C) "Circular dichroism spectra of biomolecules from TDDFT"
 IsC10_cdtide (ISCRA C) "Circular dichroism from time-dependent DFT"
 IsC09_cdamipep (ISCRA C) "Circular dichroism of amino acids and peptides"
 IsC07_CDpep (ISCRA C) "Circular dichroism of peptides"
 IsC06_oprope (ISCRA C) "Optical properties of peptides"
 IsC01_ADISPE (ISCRA C) "Ab initio calculation of the circular dichroism of peptides"

Contributi all'organizzazione
di conferenze

23rd ETSF workshop on electronic excitations "Interdisciplinary views on quantum many-body theory", Milano, 10-14/09/2018 (<https://workshop.etsf.eu/>): membro del comitato organizzatore locale
 Workshop on Dynamical Phenomena at Surfaces (WDPS-17), Milano, 19-21/09/2016 (<http://wdps17.fisica.unimi.it/>): membro del comitato organizzatore locale
 International School of Solid State Physics, 68th Course: The Free Electron Laser for Ultrafast Imaging at the Nanoscale, Erice, 05-10/06/2016: assistenza agli organizzatori
 10th International Conference on Bioinorganic Chemistry (ICBIC), Firenze, 26-31/08/2001: contributi all'organizzazione
 XIX International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems (ICMRBS) Firenze, 20-25/08/2000: contributi all'organizzazione

ATTIVITÀ DI RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI E INTERNAZIONALI

(inserire titolo congresso/convegno, data, ecc.)

Data	Titolo	Sede
14/02/2023	4th Workshop "Condensed Matter Highlights", Dip. Fisica, Università degli Studi di Milano. Orale: "Ab initio studies of hybrid organic-antiferromagnetic interfaces: Tuning the electronic and magnetic properties of magnetic oxides by adsorption of organic molecules"	Milano
17/01/2023	Seminario: "Spettroscopia molecolare di dicroismo circolare (CD)", nell'ambito del corso "Fisica dei Sistemi a Molti Corpi" tenuto dal prof. G. Cappellini per il corso di Laurea Magistrale in Fisica presso l'Università degli Studi di Cagliari	online
11-13/01/2023	21th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods. Poster: "Ab initio studies of hybrid organic-antiferromagnetic interfaces: the case of pentacene on NiO(001)"	Trieste
12-16/09/2022	108° Congresso Nazionale SIF. Orale: "Ab initio studies of the electronic structure and optical properties of amino acids and cyclo-dipeptides"	Milano
13-17/06/2022	25th ETSF Workshop on Electronic Excitations. Orale: "Ab initio Circular Dichroism calculations with the Yambo code"	Leuven (Belgio)
04-08/04/2022	Partecipazione come tutor alla scuola internazionale "Ab-initio Many-Body Methods and Simulations with the Yambo Code"	ICTP Trieste e online
24/09/2021	MolSimEng 2021 (https://sites.google.com/site/molsimeng/home/molsimeng-20-21/molsimeng-2021-program). Poster (con flash presentation): "Ab initio circular dichroism of biomolecules: developments and applications"	Politecnico di Milano, e online
21-24/09/2021	NanoInnovation 2021 (https://www.nanoinnovation2021.eu/home/). Poster: "Ab initio circular dichroism: developments and applications to biomolecules and drug molecules"	Roma (Univ. La Sapienza), e online
13-17/09/2021	107° Congresso Nazionale SIF (https://www.sif.it/attivita/congresso/107). Orale: "Ab initio circular dichroism of biomolecules: developments and applications"	online
8-9, 15-16/04/2021	Partecipazione come tutor alla "Virtual school on electronic excitations in solids and nanostructures using the Yambo code" (http://www.yambo-code.org/2021/02/25/virtual-school-on-electronic-excitations-in-solids-and-nanostructures-using-the-yambo-code)	online

30/09 - 04/10/2019	FISMAT2019. Orale: “ <i>Modeling the porous silicon - eumelanin interface: optical properties of Si(001)-adsorbed eumelanin</i> ”	Catania
16-20/09/2019	24 ETSF Workshop on Electronic Excitations. Poster: “ <i>Optical properties of eumelanin-functionalized silicon surfaces: tetramers of DHI-like molecules on Si(001)</i> ”	Jena (Germania)
20-21/02/2019	2nd NFFA Europe Science Workshop. Poster: “ <i>Out-of-plane complexity in eumelanin protomolecules: effects of extensive stacking on optical absorption spectra of DHI-like monomers</i> ”	Milano
15/02/2019	3rd Workshop “Condensed Matter Highlights”, Dip. Fisica, Università degli Studi di Milano. Orale: “ <i>Optical properties of free, stacked and Si(001)-adsorbed eumelanin protomolecules</i> ”	Milano
22-26/10/2018	Materials.it 2018. Orale: “ <i>Stacked arrangements of DHI-like monomers as a model of out-of-plane complexity in eumelanin protomolecules</i> ”	Bologna
26/09/2018	MolSimEng workshop 2018 (Molecular Simulation and Engineering). Poster: “ <i>3-D arrangement and its effect on optical absorption spectra of eumelanin protomolecules: a plane wave DFT/TDDFT study on extensive stacking of DHI-like monomers</i> ”	Milano
10-14/09/2018	23 rd ETSF Workshop on Electronic Excitations: Interdisciplinary views on quantum many-body theory. Poster: “ <i>Out-of-plane complexity in eumelanin protomolecules: effects of extensive stacking on optical absorption spectra of DHI-like monomers</i> ”	Milano
01-05/10/2017	FISMAT2017: Italian National Conference on the Physics of Matter. Orale: “ <i>Effect of stacking on the optical properties of eumelanin protomolecules: a TD-DFT study</i> ”. Poster: “ <i>Sp carbon chains suspended across nucleobase-functionalized Si(001) surfaces</i> ”	Trieste
04-07/09/2017	ETSF workshop 2017. Orale: “ <i>Organic functionalization of a semiconductor surface: pyrimidinic nucleobases adsorbed on Si(001) - optical and electronic properties, chemical and structural sensitivity</i> ”	Frascati (Roma)
17/07/2017	Seminario: “ <i>Optical properties of stacked eumelanin protomolecules</i> ” (nell'ambito di una riunione del progetto EnAPSi)	Università degli Studi di Cagliari
28-29/06/2017	Congresso del Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano. Poster: “ <i>Optical properties of stacked eumelanin protomolecules</i> ”	Milano
12-16/12/2016	Materials.it. Orale: “ <i>Electronic and optical properties of organically functionalized silicon surfaces: uracil-like nucleobases on Si(001)</i> ”	Aci Castello (CT)
30/09/2016	MolSimEng, Molecular Simulation and Engineering. Orale: “ <i>Uracil-like nucleobases on Si(001): effect of molecule adsorption, geometry and chemical substitutions on the electronic and optical properties of the silicon surface</i> ”	Milano
19-21/09/2016	Workshop on Dynamical Phenomena at Surfaces. Orale: “ <i>Uracil-like nucleobases on Si(001): effect of molecule adsorption, geometry and chemical substitutions on the electronic and optical properties of the silicon surface</i> ”	Milano
04-09/09/2016	CMD, Condensed Matter in Groningen. Orale: “ <i>Ab initio circular dichroism and conformational flexibility of amino acids</i> ”	Groningen (Paesi Bassi)
05-08/07/2016	NN16, International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies. Orale: “ <i>Uracil-like nucleobases adsorbed on the Silicon(001) surface: an ab initio study of electronic and optical properties</i> ”	Thessaloniki (Grecia)
05-10/06/2016	International School of Solid State Physics, 68th Course: The Free Electron Laser for Ultrafast Imaging at the Nanoscale. Poster: “ <i>Electronic and optical properties of uracil-like nucleobases on Silicon(001)</i> ”	Erice (TP)
08/ 03/ 2016	Seminario: “ <i>Le proprietà elettroniche delle molecole sulle superfici solide: Timina, uracile e 5-fluorouracile su silicio(001)</i> ”	OAC – Osservatorio Astronomico di Cagliari
24/09/2015	2nd Workshop “Condensed Matter Highlights”, Dip. Fisica, Università degli Studi di Milano. Orale: “ <i>A first-principle study of the atomic and electronic properties of thymine molecule adsorbed on the Silicon(001) surface</i> ”	Milano
14-18/09/2015	7th School on Organic Electronics, From Semiconductor to Biomolecular Interfaces. Poster: “ <i>Thymine adsorbed on the Silicon(001) surface: atomic and electronic properties</i> ”	Como
06-10/09/2015	Ψk 2015 Conference. Orale: “ <i>A first-principle study of the atomic and electronic properties of thymine molecule adsorbed on the Silicon(001) surface</i> ”	Donostia / San Sebastian (Spagna)
17/02/2015	Seminario: “ <i>Circular dichroism spectra and conformational flexibility of small</i> ”	Università degli Studi

	<i>biomolecules determined within first-principles methods</i>	di Cagliari
23-26/09/2014	19th ETSF Workshop on Electronic Excitations, Complex systems in Biology and Nanoscience. Orale: <i>“Ab initio circular dichroism and conformational flexibility of amino acids”</i>	Zaragoza (Spagna)
01-04/10/2013	18th ETSF Workshop on Electronic Excitations, Applications to functional and energy materials. Poster: <i>“Ab initio circular dichroism spectra of small biomolecules”</i>	Lussemburgo
25/09/2013	1st Workshop “Condensed Matter Highlights”, Dip. Fisica, Università degli Studi di Milano. Orale: <i>“Ab initio circular dichroism spectra of small biomolecules”</i>	Milano
09-13/09/2013	FISMAT2013: Italian National Conference on Condensed Matter Physics. Poster: <i>“Ab initio circular dichroism spectra of small biomolecules”</i>	Milano
27-30/09/2011	16th ETSF Workshop on Electronic Excitations, Bridging theory and experiment. Orale: <i>“Ab initio electronic spectra of peptides”</i>	Torino
16-20/05/2011	ETSF Young Researchers’ Meeting. Poster: <i>“Theoretical spectroscopy of peptides: effects of conformational changes”</i>	Napoli
24-28/01/2011	XV School of Pure and Applied Biophysics: Protein Stability and Pathways of Self-Assembly. Poster: <i>“Electronic spectra of peptides: effects of conformational changes”</i>	Venezia
12-15/10/2010	15th ETSF Workshop on Electronic Excitations, New Frontiers in Theoretical Spectroscopy and Quantum Transport. Orale su invito: <i>“Electronic spectra of peptides: effects of conformational changes”</i>	Berlino (Germania)
12-16/09/2010	Ψk Conference 2010. Poster: <i>“Towards ab initio circular dichroism spectroscopy of peptides”</i>	Berlino (Germania)
19-25/07/2010	Epioptics 11, International School of Solid State Physics. Poster: <i>“Ab initio calculation of the circular dichroism of peptides”</i>	Erice (TP)
31/05-04/06/2010	ETSF Young Researchers’ Meeting. Poster: <i>“Ab initio circular dichroism spectroscopy of peptides”</i>	Jyvaskyla (Finlandia)
11-12/02/2010	Workshop: “Physics of protein folding and aggregation”. Solo partecipazione.	Bressanone (BZ)
04-08/09/2007	2nd European Conference on Chemistry for Life Sciences. Poster: <i>“Metal ion-induced conformational changes in Cyclosporin A, investigated by NMR and molecular dynamics simulations”</i>	Wroclaw (Polonia)
04-08/10/2005	1st European Conference on Chemistry for Life Sciences, Understanding the chemical mechanisms of life. Poster: <i>“Structure and stability of the Cu(II) complexes with tandem repeats of the chicken prion”</i>	Rimini
11-16/07/2005	XXXIII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana. Poster: <i>“SIMQUADNMR, a tool for the simulation of multiple quantum filtered NMR spectra of quadrupolar nuclei”</i>	Siena
18-19/12/2003	GICC2003 (V Edizione del Congresso del Gruppo Italiano di Chimica Computazionale: dal Calcolo della Struttura Elettronica alla Bioinformatica). Poster: <i>“NMR structural model of the interaction of herbicides with the photosynthetic reaction center from Rhodobacter sphaeroides”</i>	Pontignano (SI)
16-19/09/2003	Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche (GIDRM), XXXIII Annual Congress. Poster: <i>“Inferences on Cr(V) or Cr(IV) Species Formed by Reduction of Dichromate in vitro: UV-vis, EPR, NMR and Mass-Spectrometric Studies”</i>	Bressanone (BZ)
25-30/05/2003	10th Chianti Workshop on Magnetic Resonance: Nuclear And Electron Relaxation. Poster: <i>“NMR structural model of the interaction of acifluorfen with the photosynthetic reaction center from Rhodospseudomonas viridis”</i>	San Miniato (PI)
29-30/11/2002	2nd Workshop on Pharmaco-Bio-Metallics. Poster: <i>“The role of transition metal ions in the biological activity of aminoglycosidic antibiotics. Structural and dynamical features of the copper complexes of lincomycin and kanamycin A in water solution”</i>	Pontignano (SI)
18-21/09/2002	Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche (GIDRM), XXXII Annual Congress. Posters: 1) <i>“The effect of Ce(III) on the conformation of angiotensin II in aqueous solution as probed by 1H-NMR spectroscopy”</i> ; 2) <i>“NMR studies of the interactions between a fragment of human adenosine A2A receptor and its antagonist SCH58261”</i>	Pavia
26-31/08/2001	10th International Conference on Bioinorganic Chemistry (ICBIC). Posters: 1) <i>“Metallochaperones and metal transporting ATPases: a comparative analysis of sequences and structures”</i> ; 2) <i>“Molecular dynamics simulations of cyt</i>	Firenze

	<i>b5 and superoxide dismutase: structure and mobility”; 3) “Ab initio calculations on cytochrome b5 heme site”</i>	
25/05-01/06/2001	9 th Chianti workshop on Magnetic Resonance: Nuclear and Electron Relaxation. Solo partecipazione.	Tirrenia (PI)
20-25/08/2000	XIX International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems (ICMRBS). Partecipazione e contributi all'organizzazione	Firenze
30/05-05/06/1999	8 th Chianti Workshop on Magnetic Resonance: Nuclear And Electron Relaxation. Solo partecipazione.	San Miniato (PI)

TITOLI DI CUI ALL'ARTICOLO 24 COMMA 3 LETTERA A) E B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240

(indicare se contratto di tipologia A o B, Ateneo, data di decorrenza e fine contratto, ecc.)

--

PRODUZIONE SCIENTIFICA

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

H-index: 12 (Scopus)

Articoli su riviste
1) E. Molteni, G. Mattioli, P. Alippi, L. Avaldi, P. Bolognesi, L. Carlini, F. Vismarra, Y. Wu, R. Borrego Varillas, M. Nisoli, M. Singh, M. Valadan, C. Altucci, R. Richter and D. Sangalli “A systematic study of the valence electronic structure of cyclo(Gly-Phe), cyclo(Trp-Tyr) and cyclo(Trp-Trp) dipeptides in the gas phase”, Phys. Chem. Chem. Phys. 2021, 23, 26793, DOI: 10.1039/d1cp04050b
2) E. Molteni, G. Onida, M. Ceccarelli, G. Cappellini “Ab Initio Spectroscopic Investigation of Pharmacologically Relevant Chiral Molecules: The Cases of Avibactam, Cephems, and Idelalisib as Benchmarks for Antibiotics and Anticancer Drugs”, Symmetry 2021, 13, 601, DOI: 10.3390/sym13040601.
3) E. Molteni, G. Cappellini, R. Cardia, G. Onida, G. Mula “Eumelanin Adsorption on Silicon: Optical Properties of Si(001)-Adsorbed Eumelanin Tetrameric Protomolecule”, J. Phys. Chem. C 2020, 124, 9376, DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c01293.
4) E. Molteni, G. Cappellini, G. Onida, G. Mula “Extensive stacking of DHI-like monomers as a model of out-of-plane complexity in eumelanin protomolecules: Chemical and structural sensitivity of optical absorption spectra”, Chem. Phys. 2019, 524, 92, DOI: 10.1016/j.chemphys.2019.04.029.
5) E. Molteni, G. Fratesi, G. Cappellini, G. Onida “Optical Properties of Free and Si(001)-Adsorbed Pyrimidinic Nucleobases”, Physica Status Solidi B, 2017, 1700497, DOI: 10.1002/pssb.201700497.
6) E. Molteni, G. Cappellini, G. Onida, G. Fratesi “Optical properties of organically functionalized Silicon surfaces: uracil-like nucleobases on Si(001)”, Phys. Rev. B, 2017, 95, 075437, DOI: 10.1103/PhysRevB.95.075437.
7) R. Cardia, G. Mallocci, G.-M. Rignanese, X. Blase, E. Molteni, G. Cappellini “Electronic and optical properties of hexathiapentacene in the gas and crystal phases”, Phys. Rev. B, 2016, 93, 235132, DOI: 10.1103/PhysRevB.93.235132.
8) E. Molteni, G. Onida, G. Cappellini, “Electronic structure of Uracil-like nucleobases adsorbed on Si(001): Uracil, Thymine and 5-Fluorouracil”, Eur. Phys. J. B, 2016, 89, 98, DOI: 10.1140/epjb/e2016-70011-1.
9) E. Molteni, G. Onida, G. Tiana, “Conformational dependence of the circular dichroism spectra of single amino acids from plane-waves-based density functional theory calculations”, J. Phys. Chem. B, 2015, 119, 4803, DOI: 10.1021/jp5118568.
10) E. Gaggelli, N. Gaggelli, E. Molteni, G. Valensin, D. Balenci, M. Wrońska, W. Szczepanik, J. Nagaj, J. Skała, M. Jeżowska-Bojczuk “Coordination pattern, solution structure and DNA damage studies of the copper(II) complex with the unusual aminoglycoside antibiotic hygromycin B”, Dalton Trans., 2010, 39, 9830, DOI: 10.1039/c0dt00458h.
11) D. Balenci, N. D’Amelio, E. Gaggelli, N. Gaggelli, L. Cellai, E. Molteni, G. Valensin “Structural Features of Apramycin Bound at the Bacterial Ribosome A Site as Detected by NMR and CD Spectroscopy”, ChemBioChem, 2010, 11, 166, DOI: 10.1002/cbic.200900629.
12) D. Valensin, Ł. Szyrwił, F. Camponeschi, M. Rowińskaśyrek, E. Molteni, E. Jankowska, A. Szymanska, E. Gaggelli, G. Valensin, H. Kozłowski “Heteronuclear and homonuclear Cu ²⁺ , Zn ²⁺ -complexes with multihistidine peptides based on zebrafish prion-like protein”, Inorg. Chem., 2009, 48, 7330, DOI: 10.1021/ic9008202.

13) G. Valensin, E. Molteni, D. Valensin, M. Taraszkiewicz, H. Kozłowski “Molecular Dynamics Study of the Cu ²⁺ -Binding-Induced “Structuring” of the N-terminal Domain of Human Prion Protein”, J. Phys. Chem. B, 2009, 113, 3277, DOI: 10.1021/jp901030a.
14) D. Balenci, G. Bonechi, N. D’Amelio, E. Gaggelli, N. Gaggelli, E. Molteni, G. Valensin, W. Szczepanik, M. Dziuba, G. Święcicki, M. Jeżowska-Bojczuk “Structural features and oxidative stress towards plasmid DNA of apramycin copper complex”, Dalton Trans., 2009, 1123, DOI: 10.1039/b815046j.
15) D. Balenci, F. Bernardi, L. Cellai, N. D’Amelio, E. Gaggelli, N. Gaggelli, E. Molteni, G. Valensin “Effect of Cu(II) on the Complex between Kanamycin A and the Bacterial Ribosomal A-site”, ChemBioChem, 2008, 9, 114, DOI: 10.1002/cbic.200700387.
16) E. Gaggelli, Z. Grzonka, H. Kozłowski, C. Migliorini, E. Molteni, D. Valensin, G. Valensin “Structural features of the Cu(II) complex with the rat Ab(1-28) fragment”, Chem. Comm., 2008, 341, DOI: 10.1039/b713453c.
17) E. Gaggelli, A. Janicka-Klos, E. Jankowska, H. Kozłowski, C. Migliorini, E. Molteni, D. Valensin, G. Valensin, E. Wiczerzak “NMR Studies of the Zn ²⁺ Interactions with Rat and Human β -Amyloid (1-28) peptides in water-micelle environment”, The Journal of Physical Chemistry, B, 2008, 112, 100, DOI: 10.1021/jp075168m.
18) F. Bernardi, N. D’Amelio, E. Gaggelli, E. Molteni, G. Valensin “Solution structures of cyclosporin A and its complex with dysprosium(III) in SDS micelles: NMR and molecular dynamics studies”, The Journal of Physical Chemistry, B, 2008, 112, 828, DOI: 10.1021/jp076837z.
19) M. Cappannelli, E. Gaggelli, M. Jeżowska-Bojczuk, E. Molteni, A. Mucha, E. Porciatti, D. Valensin, G. Valensin “ ¹ H- and ¹³ C-NMR study of the complex formed by copper(II) with the nucleoside antibiotic sinefungin”, Journal of Inorganic Biochemistry, 2007, 101, 1005, DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2007.03.012.
20) P. Stanczak, D. Valensin, E. Porciatti, E. Jankowska, Z. Grzonka, E. Molteni, E. Gaggelli, G. Valensin, H. Kozłowski “Tandem Repeat-Like Domain of “Similar to Prion Protein” (StPrP) of Japanese Pufferfish Binds Cu ²⁺ as Effectively as the Mammalian Protein”, Biochemistry, 2006, 45, 12227, DOI: 10.1021/bi061123k.
21) F. Bernardi, E. Gaggelli, E. Molteni, E. Porciatti, D. Valensin, G. Valensin “ ¹ H and ¹³ C-NMR and molecular dynamics studies of Cyclosporin A interacting with magnesium(II) or cerium(III) in acetonitrile. Conformational changes and cis-trans conversion of peptide bonds”, Biophysical Journal, 2006, 90, 1350, DOI: 10.1529/biophysj.105.074245.
22) P. Stańczak, D. Valensin, P. Juszczuk, Z. Grzonka, C. Migliorini, E. Molteni, G. Valensin, E. Gaggelli, H. Kozłowski “Structure and stability of the Cu(II) complexes with tandem repeats of the chicken prion”, Biochemistry, 2005, 44, 12940, DOI: 10.1021/bi051177e.
23) P. Stańczak, D. Valensin, P. Juszczuk, Z. Grzonka, G. Valensin, F. Bernardi, E. Molteni, E. Gaggelli, H. Kozłowski “Fine tuning the structure of the Cu ²⁺ complex with the prion protein chicken repeat by proline isomerization”, Chemical Communications, 2005, 26, 3298, DOI: 10.1039/b504986e.
24) E. Gaggelli, F. Bernardi, E. Molteni, R. Pogni, D. Valensin, G. Valensin, M. Remelli, M. Luczkowski, H. Kozłowski “Interaction of the human prion PrP(106-126) sequence with copper (ii), manganese(ii), and zinc(ii): NMR and EPR studies”, JACS, 2005, 127, 996, DOI: 10.1021/ja045958z.
25) N. D’Amelio, E. Gaggelli, E. Molteni, G. Valensin “SIMQUADNMR. A program for simulation and interpretation of multiple quantum filtered NMR spectra of quadrupolar nuclei”, Journal of Magnetic Resonance, 2005, 172, 142, DOI: 10.1016/j.jmr.2004.10.005.
26) N. D’Amelio, E. Gaggelli, P. Mlynarz, E. Molteni, G. Valensin, W. Lubitz “NMR structural model of the interaction of herbicides with the photosynthetic reaction center from Rhodobacter sphaeroides”, ChemBioChem, 2004, 5, 1237, DOI: 10.1002/cbic.200400012.
27) N. D’Amelio, E. Gaggelli, N. Gaggelli, F. Mancini, E. Molteni, D. Valensin, G. Valensin “Probing the role of metal ions on reversible peptide-protein interactions by NMR”, Spectroscopy, 2004, 18(2), 251, DOI: 10.1155/2004/583454.
28) N. D’Amelio, E. Gaggelli, N. Gaggelli, E. Molteni, M.C. Baratto, G. Valensin, M. Jeżowska-Bojczuk, W. Szczepanik “NMR and EPR structural delineation of copper(II) complexes formed by kanamycin A in water”, Dalton Transactions, 2004, 363, DOI: 10.1039/b313060f.
29) N. D’Amelio, E. Gaggelli, N. Gaggelli, F. Mancini, E. Molteni, D. Valensin, G. Valensin “The structure of the Ce(III)-Angiotensin II complex as obtained from NMR data and molecular dynamics calculations”, Journal of Inorganic Biochemistry, 2003, 95, 225, DOI: 10.1016/S0162-0134(03)00098-9.
30) F. Arnesano, L. Banci, I. Bertini, S. Ciofi-Baffoni, E. Molteni, D. L. Huffman, T. V. O’Halloran “Metallochaperones and metal transporting ATPases: a comparative analysis of sequences and structures”, Genome Research, 2002, 12, 255, DOI: 10.1101/gr.196802.

Atti di convegni
E. Molteni, G. Cappellini, D. Sangalli “Ab initio circular dichroism with the Yambo code: applications to dipeptides”, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2022, 1265, 012005, DOI: 10.1088/1757-899X/1265/1/012005
E. Molteni, G. Mattioli, D. Sangalli “Ab initio Circular Dichroism with the Yambo code: beyond the Independent Particle approximation”, IL NUOVO CIMENTO, 2022, 45 C, 175, DOI: 10.1393/ncc/i2022-22175-7 (Communications: SIF Congress 2021)
G. Fratesi, E. Molteni, G. Onida “Spectroscopy of Adsorbates and the Role of Interfacial Interactions”, in “Toward a Science Campus in Milan” Ed. by P. F. Bortignon, G. Lodato, E. Meroni, M. G. A. Paris, L. Perini, A. Vicini, Springer, 2018.
E. Molteni, G. Onida, G. Tiana “Towards ab initio calculation of the circular dichroism of peptides”, pp. 107-113, in Epioptics-11, The science and culture, Physics, Ed. by Cricenti, World Scientific (2012), www.worldscientific.com/worldscibooks/10.1142/8555

Data

16/03/2023

Luogo

Milano