



**AL MAGNIFICO RETTORE
DELL'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MILANO
COD. ID: 5243**

La sottoscritta chiede di essere ammessa a partecipare alla selezione pubblica, per titoli ed esami, per il conferimento di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Fisica.

Responsabile scientifico: Prof. Guido Fratesi

Elena Molteni
CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

Cognome	Molteni
Nome	Elena

OCCUPAZIONE ATTUALE

Incarico	Struttura
Assegnista di Ricerca	ISM-CNR

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

Titolo	Corso di studi	Università	anno conseguimento titolo
Laurea Magistrale o equivalente	Fisica	Università' degli Studi di Milano	1996
Dottorato Di Ricerca	Scienze Chimiche	Università' degli Studi di Firenze	2001

Ulteriori corsi:

- 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)



LINGUE STRANIERE CONOSCIUTE

lingue	livello di conoscenza
Inglese	Ottimo

ATTIVITÀ DI RICERCA

2020- (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, Abinit, Yambo, MolGW;
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



ASSEGNI DI RICERCA

01/06/2020 – 31/05/2022: ISM – CNR. Titolo: “Sviluppo di teoria e metodi numerici e simulazioni di principi primi di molecole biologiche eccitate mediante l’azione di radiazione nell’ultravioletto profondo”
01/01/2013 – 31/12/2013: Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano (Assegno di ricerca legge 240/2010). Titolo: “Dicroismo circolare di biomolecole: oltre l’approssimazione di particelle indipendenti”
01/08/2010 – 31/07/2011: Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano (Assegno di ricerca legge 449/97). Titolo: “Calcolo degli spettri di dicroismo circolare di biomolecole”

ATTIVITÀ PROGETTUALE

Anno	Progetto
2010 – 2020	Principal Investigator nei seguenti progetti CINECA (http://www.hpc.cineca.it/services/iscra) per l'accesso a risorse di supercalcolo: uMI19_FisMol, IsC77_AbRASTeS, IsC64_EuTetraS, IsC58_ChemDEum, IsC49_OproSIsC07_Cdpep, tEu, IsC38_OptNclSi, IsC27_PrebSurf, IsC12_CDSBiT, IsC10_cdtide, IsC09_cdamipep, IsC07_Cdpep, IsC01_ADISPE
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	2012-2013: ETSF scientist in charge dello user project n. 446 “Ab initio calculation of circular dichroism spectra for biological molecules”

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 come referee:

- Referee per articoli su: Chirality, Optical Materials, Cellulose
- Referee per progetti IscraC e IscraB per l'assegnazione di risorse di supercalcolo al CINECA

CONGRESSI, CONVEGNI E SEMINARI

Data	Titolo	Sede
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



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

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: "Modeling the porous silicon - eumelanin interface: optical properties of Si(001)-adsorbed eumelanin"	Catania
16-20/09/2019	24 ETSF Workshop on Electronic Excitations. Poster: "Optical properties of eumelanin-functionalized silicon surfaces: tetramers of DHI-like molecules on Si(001)"	Jena (Germania)
20-21/02/2019	2nd NFFA Europe Science Workshop. Poster: "Out-of-plane complexity in eumelanin protomolecules: effects of extensive stacking on optical absorption spectra of DHI-like monomers"	Milano
15/02/2019	3rd Workshop "Condensed Matter Highlights", Dip. Fisica, Università degli Studi di Milano. Orale: "Optical properties of free, stacked and Si(001)-adsorbed eumelanin protomolecules"	Milano
22-26/10/2018	Materials.it 2018. Orale: "Stacked arrangements of DHI-like monomers as a model of out-of-plane complexity in eumelanin protomolecules"	Bologna
26/09/2018	MolSimEng workshop 2018 (Molecular Simulation and Engineering). Poster: "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"	Milano
10-14/09/2018	23 rd ETSF Workshop on Electronic Excitations: Interdisciplinary views on quantum many-body theory. Poster: "Out-of-plane complexity in eumelanin protomolecules: effects of extensive stacking on optical absorption spectra of DHI-like monomers"	Milano
01-05/10/2017	FISMAT2017: Italian National Conference on the Physics of Matter. Orale: "Effect of stacking on the optical properties of eumelanin protomolecules: a TD-DFT study". Poster: "Sp carbon chains suspended across nucleobase-functionalized Si(001) surfaces"	Trieste
04-07/09/2017	ETSF workshop 2017. Orale: "Organic functionalization of a semiconductor surface: pyrimidinic nucleobases adsorbed on Si(001) - optical and electronic properties, chemical and structural sensitivity"	Frascati (Roma)
17/07/2017	Seminario: "Optical properties of stacked eumelanin protomolecules" (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: "Optical properties of stacked eumelanin protomolecules"	Milano
12-16/12/2016	Materials.it. Orale: "Electronic and optical properties of organically functionalized silicon surfaces: uracil-like nucleobases on Si(001)"	Aci Castello (CT)
30/09/2016	MolSimEng, Molecular Simulation and Engineering. Orale: "Uracil-like nucleobases on Si(001): effect of molecule adsorption, geometry and chemical substitutions on the electronic and optical properties of the silicon surface"	Milano
19-21/09/2016	Workshop on Dynamical Phenomena at Surfaces. Orale: "Uracil-like nucleobases on Si(001): effect of molecule adsorption, geometry and chemical substitutions on the electronic and optical properties of the silicon surface"	Milano
04-09/09/2016	CMD, Condensed Matter in Groningen. Orale: "Ab initio circular dichroism and conformational flexibility of amino acids"	Groningen (Paesi Bassi)
05-08/07/2016	NN16, International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies. Orale: "Uracil-like nucleobases adsorbed on the Silicon(001) surface: an ab initio study of electronic and optical properties"	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: "Electronic and optical properties of uracil-like nucleobases on Silicon(001)"	Erice (TP)
08/ 03/ 2016	Seminario: "Le proprietà elettroniche delle molecole sulle superfici solide: Timina, uracile e 5-fluorouracile su silicio(001)"	OAC – Osservatorio Astronomico di Cagliari
24/09/2015	2nd Workshop "Condensed Matter Highlights", Dip. Fisica, Università degli Studi di Milano. Orale: "A first-principle study of the atomic and electronic properties of thymine molecule adsorbed on the Silicon(001) surface"	Milano



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI 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	Ψ k 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 biomolecules determined within first-principles methods"</i>	Università degli Studi 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	Ψ k Conference 2010. Poster: <i>"Towards ab initio circular dichroism spectroscopy of peptides"</i>	Berlino (Germania)
19-25/07/2010	Epiotics 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 Rhodospirillum rubrum"</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	San Miniato (PI)



	Relaxation. Poster: “NMR structural model of the interaction of acifluorfen with the photosynthetic reaction center from <i>Rhodospseudomonas viridis</i> ”	
29-30/11/2002	2nd Workshop on Pharmaco-Bio-Metallics. Poster: “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”	Pontignano (SI)
18-21/09/2002	Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche (GIDRM), XXXII Annual Congress. Posters: 1) “The effect of Ce(III) on the conformation of angiotensin II in aqueous solution as probed by ¹ H-NMR spectroscopy”; 2) “NMR studies of the interactions between a fragment of human adenosine A2A receptor and its antagonist SCH58261”	Pavia
26-31/08/2001	10th International Conference on Bioinorganic Chemistry (ICBIC). Posters: 1) “Metallochaperones and metal transporting ATPases: a comparative analysis of sequences and structures”; 2) “Molecular dynamics simulations of cyt b5 and superoxide dismutase: structure and mobility”; 3) “Ab initio calculations on cytochrome b5 heme site”	Firenze
25/05-01/06/2001	9th 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	8th Chianti Workshop on Magnetic Resonance: Nuclear And Electron Relaxation. Solo partecipazione.	San Miniato (PI)

PUBBLICAZIONI [30 articoli peer-reviewed su rivista; H-index: 12 (Scopus)]

Articoli sottomessi
E. Molteni, G. Cappellini, D. Sangalli, “Ab initio Circular Dichroism with the Yambo code: applications to dipeptides”, sottomesso come NanoInnovation 2021 Conference Proceeding
E. Molteni, G. Mattioli, D. Sangalli, “Ab initio Circular Dichroism with the Yambo code: beyond the Independent Particle approximation”, sottomesso come SIF conference proceeding

Articoli peer-reviewed pubblicati 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”, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 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”, <i>Symmetry</i> 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”, <i>J. Phys. Chem. C</i> 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”, <i>Chem. Phys.</i> 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”, <i>Physica Status Solidi B</i> , 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)”, <i>Phys. Rev. B</i> , 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”, <i>Phys. Rev. B</i> , 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", <i>Eur. Phys. J. B</i> , 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", <i>J. Phys. Chem. B</i> , 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. Skala, M. Jeżowska-Bojczuk "Coordination pattern, solution structure and DNA damage studies of the copper(II) complex with the unusual aminoglycoside antibiotic hygromycin B", <i>Dalton Trans.</i> , 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", <i>ChemBioChem</i> , 2010, 11, 166, DOI: 10.1002/cbic.200900629.
12) D. Valensin, Ł. Szyrwił, F. Camponeschi, M. Rowińska-Śyrek, 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", <i>Inorg. Chem.</i> , 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", <i>J. Phys. Chem. B</i> , 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", <i>Dalton Trans.</i> , 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", <i>ChemBioChem</i> , 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", <i>Chem. Comm.</i> , 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. Wiecek "NMR Studies of the Zn ²⁺ Interactions with Rat and Human β -Amyloid (1-28) peptides in water-micelle environment", <i>The Journal of Physical Chemistry, B</i> , 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", <i>The Journal of Physical Chemistry, B</i> , 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 "1H- and 13C-NMR study of the complex formed by copper(II) with the nucleoside antibiotic sinefungin", <i>Journal of Inorganic Biochemistry</i> , 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", <i>Biochemistry</i> , 2006, 45, 12227, DOI: 10.1021/bi061123k.
21) F. Bernardi, E. Gaggelli, E. Molteni, E. Porciatti, D. Valensin, G. Valensin "1H and 13C-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", <i>Biophysical Journal</i> , 2006, 90, 1350, DOI: 10.1529/biophysj.105.074245.
22) P. Stańczak, D. Valensin, P. Juszczak, 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", <i>Biochemistry</i> , 2005, 44, 12940, DOI: 10.1021/bi051177e.
23) P. Stańczak, D. Valensin, P. Juszczak, 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", <i>Chemical Communications</i> , 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 Rhodospirillum rubrum", 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
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 Epiptics-11, The science and culture, Physics, Ed. by Cricenti, World Scientific (2012), www.worldscientific.com/worldscibooks/10.1142/8555

ATTIVITA' DIDATTICA

2010-2020: Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano: art.45 (tutorato ed esami) per il corso di Struttura della Materia 1
24/02/2020 - 30/06/2020: Dipartimento di Scienze per gli Alimenti, la Nutrizione e l'Ambiente, Università degli Studi di Milano: art.45 (esercitazioni) per il corso di Fisica
24/02/2020 - 05/06/2020: Dipartimento di Fisica, Politecnico di Milano: Esercitazioni per il corso: FONDAMENTI DI FISICA SPERIMENTALE I E B (INTEGR.)

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

Il presente curriculum, non contiene dati sensibili e dati giudiziari di cui all'art. 4, comma 1, lettere d) ed e) del D.Lgs. 30.6.2003 n. 196.

RICORDIAMO che i **curricula SARANNO RESI PUBBLICI sul sito di Ateneo** e pertanto si prega di non inserire dati sensibili e personali. Il presente modello è già precostruito per soddisfare la necessità di pubblicazione senza dati sensibili.

Si prega pertanto di **NON FIRMARE** il presente modello.

Luogo e data: Milano, 04/03/2022