



## CURRICULUM VITAE

FORMATO EUROPEO/EUROPEAN FORMAT

### INFORMAZIONI PERSONALI

Nome **Henriette MOLINARI**

Indirizzo

Telefono

Fax

E-mail [henriettemolinari0@gmail.com](mailto:henriettemolinari0@gmail.com)

[henriette.molinari@univr.it](mailto:henriette.molinari@univr.it)

Nazionalità Italiana

Luogo e data di nascita

**SETTORE DI COMPETENZA** RISONANZA MAGNETICA NUCLEARE APPLICATA ALLO STUDIO DI MACROMOLECOLE

### ISTRUZIONE

14/7/1976 Laurea in Chimica, Università degli Studi di Milano, 110/110 e lode

## ESPERIENZA LAVORATIVA

dal 2013 ad oggi	Associata di Ricerca presso SCITEC, CNR, Laboratorio NMR, Milano
dal 12/2012	Professore ordinario in quiescenza dall'Università degli Studi di Verona
dal 2004 al 2012	Professore ordinario di Chimica Organica (CHIM/06), Dipartimento di Biotecnologie, Università degli Studi di Verona Titolare insegnamenti di Chimica Organica e Laboratorio, Risonanza Magnetica Nucleare e Imaging
dal 1992 al 2003	Professore Associato di Chimica Organica, Facoltà di Scienze, Università degli Studi di Verona. Titolare insegnamenti di Chimica Organica e Laboratorio e Biopolimeri e Analisi NMR
dal 1991 al 1992	Professore Associato di Chimica Organica, Facoltà di Farmacia, Università degli Studi di Sassari.
dal 1981 al 1990	Titolare insegnamento di Chimica Organica I Ricercatrice Chimica Organica, Istituto Chimica Industriale, Università degli Studi di Milano Tematica di ricerca: Sintesi e caratterizzazione di polimeri
dal 1986 al 1989	Esperienza all'estero presso Queen Mary College, Londra (Prof. E.W. Randall), NMR Biological Center, Leicester (Prof. G.K. Roberts, dr. L.Y.Lian) EMBL, Heidelberg (Dr. A. Pastore, Dr. A.Lesk) usufruendo delle seguenti borse: 1) CNR-NATO, 2) Accademia dei Lincei, 3) EMBO
dal 1989 al 2010	Tematica di ricerca: Caratterizzazione strutturale mediante NMR e dinamica molecolare di biomolecole con focus su antibiotici glicopeptidici Contratto di Ricerca gratuito presso il Laboratorio NMR dell'Istituto di Macromolecole del CNR di Milano Tematica di ricerca: Studi strutturali mediante Risonanza Magnetica Nucleare di macromolecole biologiche
dal 1979 to 1981	Post-Doc presso il Dyson Perrins Laboratory, Oxford (Supervisor: Prof. J.M. Brown). Tematica di ricerca: Caratterizzazione spettroscopica mediante NMR di polimeri organici e biologici.
dal 1976 al 1978	Borsista CNR presso l'Istituto di Chimica Industriale dell'Università degli Studi di Milano Tematica di ricerca : Sintesi e caratterizzazione di polimeri organici (Prof. F. Montanari)

## CAPACITÀ E COMPETENZE PERSONALI

Lingue	Inglese C1 Francese A1
--------	---------------------------

<b>Tematiche di ricerca</b>	-Caratterizzazione strutturale mediante NMR di biomolecole -Studi NMR di superfici proteiche accessibili utilizzando probe paramagnetici -Studi NMR del fold proteico -Studi NMR delle proteine trasportatrici di lipidi -Studi NMR delle interazioni proteine-nanoparticelle -Studio del meccanismo molecolare della tossicità dei peptidi Abeta nella patologia Alzheimer -Studi di sistemi amiloidi patologici e non patologici (fibroina della seta)
<b>Pubblicazioni</b>	Autrice di 152 pubblicazioni su riviste internazionali con referaggio H-index from: Scopus 31 Citazioni 3850 Google Scholar 36 Citazioni 4606 Invitata a presentare conferenze plenarie in congressi nazionali e internazionali; Organizzatrice di conferenze e Scuole nazionali e internazionali
<b>Riconoscimenti</b>	2005 Medaglia d'oro GIDRM (Gruppo Nazionale NMR per la discussione delle Risonanze Magnetiche) Nel 2006 ha ricevuto un "grant" dall'Università di Verona per l'acquisizione di uno spettrometro NMR 600 MHz con cryoprobe, che è stato installato nel suo Laboratorio nel 2007

## Partecipazione a comitati nazionali e Internazionali / Esperienze di valutazione

2016-2020	Membro del Nucleo di Valutazione dell'Università degli Studi di Napoli Federico II"
2016-2018	Membro dell' "User panel for the European infrastructure iNEXT, (H2020 progetto #653706)
2014-2017	Membro del "European Reserach Council (ERC) Panel, Starting Grant (LS1)
2016	Membro del Comitato di Selezione (CdS) per la valutazione dei progetti Nazionali (PRIN 2015) Life Science (ERC: LS1)

2010-2016	Presidente del Gruppo Italiano di Discussione per le Risonanze Magnetiche GIDRM
2015	Membro del Panel GEV-ANVUR VQR 2011- Sub-GEV 03 Chimica
2011-2013	Membro del Panel GEV-ANVUR VQR 2004-2010- Sub-GEV 03 Chimica
2007-2012	Vice-Direttrice del Dipartimento Scientifico e Tecnologico (Università degli Studi di Verona), struttura che ha poi cambiato denominazione in Dipartimento di Biotecnologie - a partire dal 1° gennaio 2009
2012-2014	Membro del Comitato nazionale ANS (Abilitazione Scientifica Nazionale) Chimica Organica
2007-2013	Rappresentante degli utenti per le Infrastrutture Europee per l'accesso all'NMR (FP7 and FP6, EU-NMR, -EAST-NMR, Bio-NMR,)
2010-2012	Rappresentante dei Professori Ordinari nel Consiglio di Amministrazione dell'Università degli Studi di Verona
dal 2009 ad oggi	Membro del Comitato Editoriale di BBA (Biochimica & Biophysica Acta)
2008	Membro del gruppo di lavoro O nella roadmap "INSTRUCT"
2005-2007	Presidente del Consiglio di Corso di Laurea in Biotecnologie Agro-Industriali dell'Università degli Studi di Verona
2004	Delegata per la Società Chimica Italiana per il "Working Group in Chemistry for Life Science" EuCheMS
2001-2004	Rappresentante dei professori Associati nel Consiglio di Amministrazione dell'Università degli Studi di Verona
2000-2004	Presidente della Divisione di Chimica dei Sistemi Biologici della Società Chimica Italiana
1996-2000	Membro del direttivo del GIDRM (Gruppo Italiano di discussione per le Risonanze Magnetiche)
dal 1998 ad oggi	Membro del Consiglio di Amministrazione della Fondazione "A. De Marco"

#### **PROGETTI DI RICERCA FINANZIATI**

2016	Coordinatrice progetto bilaterale CNR Italia-Azerbaijan "Caratterizzazione delle proprietà strutturali e foto-fisiche di biomateriali tramite EPR, FT-IR, spettroscopie Raman confocale ed NMR"
2011	Coordinatrice di Joint Project con Novartis "Studi strutturali di NMR sul meccanismo di assemblaggio dei pili nello Streptococco agalactiae Gram-positivo"
2009	Partecipante al PRIN "Studi funzionali e strutturali sul sistema di fotoprotezione integrato costituito dal ciclo delle xantofille e la dissipazione non-fotochimica dell'energia."
2007	Grant Regione Veneto "Progetto Nanomedicina: NMR applicato alle nanotecnologie" e grant Univr/CariVerona per acquisto NMR
2005	Coordinatrice nazionale scambio culturale Italia-India "NMR structural and functional studies of glycodelin: angiogenic and immunomodulating properties and their role in tumor development".
2004	Coordinatrice locale MIUR progetto di ricerca ex quota 40%, "Studio di aspetti strutturali e dinamici dell'interazione tra proteine che legano molecole idrofobiche e i loro ligandi mediante NMR eteronucleare e tecniche elettroforetiche su gradiente".
2003	Grant Consorzio Siena Ricerche per il progetto "Proteine ricche in ponti disolfuro con attività antitumorale"
2002	Coordinatrice nazionale Progetto FIRB a sportello: "Caratterizzazione strutturale mediante NMR, mutagenesi sito-diretta e proprietà di legame di proteine strutturalmente omologhe appartenenti alla famiglia delle lipocaline allo scopo di identificare un possibile comune meccanismo di folding e la relazione struttura-funzione".
2002	Coordinatrice locale MIUR progetto di ricerca ex quota 40%, "Studio di aspetti strutturali e dinamici dell'interazione tra proteine che legano molecole idrofobiche ed i loro ligandi mediante NMR eteronucleare e tecniche elettroforetiche su gradiente".
2000	Accesso alle "Large Scale Facilities" del Biophysics Centre di Francoforte per la produzione di proteine ricombinanti: "Study of the overexpression system for the production of a protein rich in disulphide bridges, the thionin precursor protein in <i>Viscum album</i> ".
2000	Coordinatrice locale MURST progetto di ricerca ex quota 40%, "Studi strutturali su proteine che legano molecole idrofobiche"
1998	Coordinatrice locale MURST progetto di ricerca ex quota 40%, "Studi strutturali su proteine che legano molecole idrofobiche"

1996

Accesso alle "Large Scale Facilities" del Biophysic Centre di Francoforte, "Structural Characterization of the acidic form of bovine  $\alpha$ -Lactoglobulin and study of its interactions with hydrophobic ligands".

1996

Progetto triennale UE (Concerted Action, Framework 4, Agriculture and Fisheries), "Molecular description of aggregation, denaturation, gelation and surface activity of whey proteins" (Progetto MADGELAS, Contratto FAIR-CT96-1202; DG12-SSMI).

## ELENCO PUBBLICAZIONI ISI

- 1) Cinquini, S. Colonna, H. Molinari, F. Montanari, P. Tundo, Heterogeneous PhaseTransfer Catalysts: Onium Salts, Crown Ethers and Cryptands Immobilized on Polymer Supports, J.C.S. Chem. Comm., 394 ,1976.
- 2) H. Molinari, F. Montanari, P. Tundo, Heterogeneous Phase-Transfer Catalysts: High Efficacy of Catalysts Bonded by a Long Chain to a Polymer Matrix, J.C.S. Chem. Comm., 639 ,1977.
- 3) H. Molinari, F. Montanari, S. Quici, P. Tundo, Polymer- Supported Phase-Transfer Catalysts. High Catalytic Activity of Ammonium and Phosphonium Salts Bonded to a Polystyrene matrix, J. Am. Chem. Soc., 101, 3920,1979.
- 4) J.M. Brown, H. Molinari, Supported Rhodium-Phospine Hydrogenation Catalysts of High Mobility and Reactivity. Tetrahedron Lett., 31, 2933 ,1979.
- 5) S. Julia, J. Guixer, J. Masana, J. Rocas, S. Colonna, R. Annunziata, H. Molinari, Synthetic Enzymes. II. Catalytic Asymmetric Epoxidation by means of Polyaminoacids in a Triphase System, J.C.S. Perkin Trans. I, 1317 ,1982.
- 6) H. Molinari, S. Banfi, Synthesis of Optically Active a-Halogeno Phosphinates via Asymmetric Selection, Synth. Commun., 12, 749, 1982.
- 7) S. Julia, J. Masana, J. Rocas, S. Colonna, R. Annunziata, H. Molinari, Synthetic Enzymes. III. Highly Stereoselective Epoxidation of Chalcones in a Triphase TolueneWater-Poly-(S)-Alanine System, Ann. Quim., 79, 102, 1983.
- 8) S. Colonna, H. Molinari, S. Banfi, S. Julia, J. Masana, A. Alvarez, Synthetic Enzymes IV. Highly Enantioselective Epoxidation by means of Polyaminoacids in a Triphase System. Influence of Structural Variations within the Catalysts, Tetrahedron, 39, 1635, 1983.
- 9) S. Banfi, S. Colonna, H. Molinari, S. Julia, High Stereoselective Synthesis of Optically Active a,b-Epoxy Alcohols, Synth. Commun., 13, 901, 1983.
- 10) S. Banfi, M. Cinquini, S. Colonna, H. Molinari, Synthesis of a-Aminoacids from Amidocyanooacetates, Patent n. 22917, 1983.
- 11) S. Banfi, M. Cinquini, S. Colonna, H. Molinari, Synthesis of a-Aminoacids from Amido-Esters, Patent n. 22916,1983.
- 12) S. Banfi, S. Colonna, H. Molinari, S. Julia, J. Guixer, Asymmetric Epoxidation of Electron-poor Olefins. V. Influence on Stereoselectivity of the Structure of Poly-aAminoacids used as Catalysts, Tetrahedron, 40, 5207, 1984.
- 13) T. Beringhelli, G. Ciani, G. D'Alfonso, H. Molinari, A. Sironi, M. Freni, A novel Coordination mode of Nitric Oxide. Synthesis and Crystal Structure of the  $[(Re_3(u-H)3(CO)_2)_2(u^4-n-NO)]$  Anion, J.C.S. Chem. Comm., 1327, 1984.
- 14) S. Colonna, S. Julia, H. Molinari, S. Banfi, Catalytic Asymmetric Epoxidation by means of polyaminoacids in a triphase system, Heterocycles, 21, 548, 1984.
- 15) T. Beringhelli, G. Ciani, G. D'Alfonso, H. Molinari, A. Sironi, New Synthesis, Reinvestigation of the Solid-State Structure and NMR Analysis of the Unsaturated Anion Tetrakis(u-hidrido)decacarbonyl-triangulo-trihenate(1-), Inorg. Chem., 24, 2666, 1985.
- 16) T. Beringhelli, H. Molinari, A. Pastore, Carbon-13 NMR Evidence of a Relaxation Process dominated by Scalar Coupling with a Quadrupolar Nucleus in  $[Re_3(uH)_4(CO)_10]$ , J.C.S. Dalton Trans., 1899, 1985.
- 17) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, H. Molinari, Carbon-13 NMR Investigation of the Properties of the Anion  $[Re_3(u-H)3(CO)_10]^-$  2- in Solution, J. Organomet. Chem., 295, C35-39 ,1985.
- 18) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, H. Molinari, Relaxation Studies of Carbonyl Rhenium Clusters. II. Relaxation Mechanisms and Estimation of the  $^{13}C$  Chemical Shielding Anisotropy in the  $[Re_3(u-H)_4(CO)_10]$ - Anion at Low Temperature, Magn. Reson. Chem., 24, 175, 1986.
- 19) M. Cinquini, A. Manfredi, H. Molinari, A. Restelli, Asymmetric Synthesis of  $\beta$ -Hydroxythioacetamides mediated by Enantiomerically Pure Sulphinyl Derivatives, Tetrahedron, 41, 4929, 1985. 20) E.M. Beccalli, A. Marchesini, H. Molinari, The Vilsmeier-Haack Reaction with 3,4Disubstituted Isossazolin-5-ones. A New Synthesis of 1,3-Oxazin-6-Ones and 1,3Oxazine-2,6-Diones, Tetrahedron Lett., 27, 627, 1986.
- 20) E.M. Beccalli, A. Marchesini, H. Molinari, The Vilsmeier-Haack Reaction with 3,4Disubstituted Isossazolin-5-ones. A New Synthesis of 1,3-Oxazin-6-Ones and 1,3Oxazine-2,6-Diones, Tetrahedron Lett., 27, 627, 1986.
- 21) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, H. Molinari, B.E. Mann, B.T. Pickup, C.M. Spencer, -The Observation of Four Separate Fluxional Processes in  $[Re_3(CO)_10H_3]^{2-}$  including an Example of the Rotation of a Re=Re Fragment on  $ReH(CO)_4$ , J.C.S. Chem. Comm. 796 , 1986.
- 22) F. Montanari, S. Quici, P.L. Anelli, H. Molinari, T. Beringhelli, New Lipophilic Multidentate Ligands: Effective Complexing Agents for Anions Activation in non Polar Media, Gazz. Chim. Ital., 116, 275, 1986.
- 23) P.L. Anelli, T. Beringhelli, H. Molinari, F. Montanari, S. Quici,  $^{13}C$  and  $^1H$  Two-dimensional NMR Characterization of the Sodium Perchlorate Complex of a New Tetraoxatetraaza Lipophilic Cage Ligand, Magn. Reson. Chem., 24, 692, 1986.
- 24) S. Quici, P.L. Anelli, H. Molinari, T. Beringhelli, Lipophilic Cage Ligands: Synthesis, Spectroscopic Properties and Applications. Pure and Appl. Chem., 58, 1503, 1986.
- 25) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, M. Freni, G. Ciani, H. Molinari, An Unusual Species from the Reaction of the Unsaturated Anion  $[Re_3(u-H)_4(CO)_10]^-$  with Me $_3$ NO. Synthesis and Spectroscopic

- Characterisation of the Adduct Anion  $[Re_3(u\text{-H})_3(CO)_9(u^3\text{O}\cdots\text{H}\cdots\text{NMe})_3]^-$  and Crystal and Molecular structure of its Tetraethylammonium salt, *J. Organometall. Chem.*, 311, 177, 1986.
- 26) P.L. Anelli, T. Beringhelli, H. Molinari, F. Montanari, S. Quici,  $^{13}\text{C}$  and  $^1\text{H}$  NMR Characterization of  $\text{Na}^+\text{ClO}_4^-$  Complex of a New Lipophilic Cage Ligand. In "Advanced Magnetic Resonance Techniques in Systems of High Molecular Complexity", Birkhauser Boston Inc., 1986.
- 27) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, M. Freni, G. Ciani, A. Sironi, H. Molinari, Synthesis and Characterisation of a new family of unsaturated triangular rhenium cluster anions of formula  $[Re_3(\mu\text{H})_4(CO)_9\text{L}]^-$  ( $\text{L}$ =neutral two-electron donor ligand). X-Ray crystal and molecular structures of the tetraethylammonium salts of the anions with  $\text{L}$ = triphenylphosphine and pyridine, *J.C.S. Dalton Transactions*, 2691-2697, 1986.
- 28) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, H. Molinari, G. Ciani, Reduction of a Coordinated Monoxide to an Oxymethyl Bridging Group: Synthesis and X-Ray Characterization of the Dianion  $[Re_3(u\text{-H})_3(u^3\text{CH}_2\text{O})(CO)_9]^{2-}$ , *Organometallics*, 6, 194, 1987.
- 29) P.L. Anelli, T. Beringhelli, H. Molinari, S. Quici, NMR Investigation of Lipophilic Cage Ligands. Part 2. Structural Assignments and Conformational Properties of the Ligand 12-hexadecyl-7,17,22,27-tetraoxa-1,4,10,14-tetraazatricyclo (12.5.5.4,10)nonacosane and of its Sodium, Potassium and Silver Complexes, *Magn. Res. Chem.*, 25, 417, 1987.
- 30) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, H. Molinari, G. Ciani, A Novel Unsaturated Tetrahedral Hydrido-Carbonyl Cluster Anion of Rhenium. Synthesis and X-Ray Characterization of  $[Re_3(u\text{-H})_3(m^3\text{-H})_2(CO)_12]$ , *J.C.S. Chem. Comm.*, 486, 1987.
- 31) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, H. Molinari, Relaxation Studies of Carbonyl Rhenium Clusters. Part 3.  $^{13}\text{C}$  NMR Study of the Properties of the Unsaturated Anion  $[Re_3(u\text{-H})_4(CO)_9(\text{NCMe})]^-$  at Low Temperature, *J.C.S. Dalton Trans.*, 2083, 1987.
- 32) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, L. Ghidorsi, G. Ciani, A. Sironi and H. Molinari, New Hydrido-Carbonyl Rhenates by Reduction of  $Re_2(CO)_10$  with Bases. X-Ray Crystal Structure of the Anion  $[Re_2\text{H}_2(m\text{-H})(CO)_8]^-$ , *Organometallics*, 6, 1365, 1987.
- 33) G.E. Hawkes, L. Lian, H. Molinari and S. Singh,  $^{15}\text{N}$  NMR Studies of the Intermolecular Interactions between Vancomycin and Ac-D-Ala-D-Ala, *J. Magn. Reson.*, 74, 188, 1987.
- 34) D. Landini, H. Molinari, M. Penso, A. Rampoldi, Convenient Procedures for the Preparation of Lipophilic Quaternary Onium Fluorides, Hydrogenofluorides and Dihydrogentrifluorides via Ion Exchange in Two-Phase Systems, *Synthesis*, 12, 953, 1988.
- 35) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, H. Molinari, G.E. Hawkes, K.D. Sales, Quantitative Analysis of 1- and 2-dimensional Magnetisation Transfer Experiments and the Mechanism of Rearrangement of  $[Re_3(u\text{-H})_4(CO)_9(\text{NCMe})]$ , *J. Magn. Reson.*, 80, 45, 1988.
- 36) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, G. Ciani, A. Sironi, H. Molinari, X-ray Crystal Structures of Two Isomers of the Hydrido-Carbonyl Anion  $[Re_7(m\text{-H})_2(CO)_21]^-$ . The Problematic Existence of triply Bridging Hydrides in Clusters Containing Intersitial Main-Group Elements, *J.C.S. Dalton Trans.*, 1281, 1988.
- 37) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, G. Ciani, A. Sironi and H. Molinari, Synthesis, Solid State (X-Ray) and Solution (Nuclear Magnetic Resonance) Studies of the Hydridocarbido Carbonyl Cluster Anion  $[Re_7\text{H}_2\text{C}(CO)_21]^-$ , *J.C.S. Dalton Trans.*, 1901, 1990.
- 38) H. Molinari, A. Pastore, L. Lian, G.E. Hawkes and K. Sales, The Structure of Vancomycin and a Vancomycin-D-Ala-D-Ala Complex in Solution, *Biochemistry*, 29, 2271, 1990.
- 39) P. Dalla Croce, C. La Rosa, H. Molinari, Pyrano[3,2-c][1,2] Benzothiazine 5,5-dioxide derivatives: Synthesis and Structural Assignment, *Gazz. Chim. Ital.*, 120, 443, 1990.
- 40) H. Molinari, S. Mammi,  $^{15}\text{N}$  Reverse Detection of Little Gastrin in Micelle Solution, *J. Magn. Reson.*, 90, 335, 1990.
- 41) G. Esposito, P. Mascagni, H. Molinari, N. Niccolai, Structural NMR Studies: From One to Multidimensional Frequency Spectra, in "NMR and Biomolecular Structure", Editors I. Bertini, H. Molinari, N. Niccolai, VCH Publisher, 1991.
- 42) L. Lattuada, E. Licandro, S. Maiorana, H. Molinari, A. Papagni, Opening of Oxirane Rings by the Conjugate Base of (MethoxyMethylCarbene)Pentacarbonyl Chromium in the Presence of  $\text{BF}_3\text{Et}_2\text{O}$ : a General and Improved Synthesis of 2-Oxacyclopentylidene Pentacarbonyl Chromium, *Organometallics*, 10, 807, 1991.
- 43) H. Molinari, R. Consonni, M. Pegna, L. Zetta, P. Neri, N. Niccolai, A. Bonci, L. Lozzi, M. Rustici, M. Scarselli,  $^1\text{H}$  and Natural Abundance  $^{15}\text{N}$  NMR Studies of a Derivative of a Rabies Glycoprotein Fragment, *Biopolymers*, 713, 1991.
- 44) N. Niccolai, A. Bonci, M. Rustici, M. Scarselli, P. Neri, G. Esposito, P. Mascagni, A. Motta and H. Molinari, NMR Delineation of Inner and Outer Protons from Paramagnetic Relaxation Perturbations in 1D and 2D Spectra of Peptides, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2*, 1453, 1991.
- 45) A. De Marco, P. Gariboldi, H. Molinari and L. Verotta, NMR Elucidation of the Structure and Conformation of a Permethylated Alditol Acetate Oligosaccharide via  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  Correlation and  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  Correlation with Proton Detection, *Carbohydrate Research*, 226, 15, 1992.
- 46) G. Esposito, A. M. Lesk, H. Molinari, A. Motta, N. Niccolai, A. Pastore, Probing Protein Structure by Solvent Perturbation of NMR Spectra: NMR Spectral Editing and Topological Mapping in Proteins by Paramagnetic Relaxation Filtering, *J. Mol. Biol.*, 224, 659, 1992.
- 47) R. Consonni, H. Molinari, F. Greco, G. Zannoni, L. Zetta, G. Carrea and S. Riva, NMR Studies of native and fragmented Subtilisin Carlsberg, *Biochim. Biophys. Acta*, 39, 1119, 1992.
- 48) H. Molinari, G. Esposito, R. Consonni, M. Pegna, L. Zetta, Distance Evaluation by means of heteronuclear SQC-NOESY Experiments, *J. Biomol. NMR*, 2, 289-299, 1992.
- 49) Appendino, E. Wollenweber, P. Gariboldi, A. Sironi, H. Molinari, Triterpenes from the Frond Exudate of the Fern *Notholaena Gregii*, *Phytochemistry*, 31, 923, 1992.
- 50) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, H. Molinari and A. Sironi, Synthesis and crystal structures of the carbido cluster anions  $[Re_6(u\text{-H})(u\text{CO})(CO)_18]^{1-}$ , *J. Chem. Soc. Dalton Trans.*, 689, 1992.
- 51) F. Menegus, L. Cattaruzza, H. Molinari, E. Ragg, Rice and wheat seedlings as plant models of high and low tolerance to anoxia, In "Surviving hypoxia: mechanisms of control and adaptation", Chapter 5, P.W. Hochachka Eds., CRC Press Inc. Boca Raton, FL, USA, Chapter 5, p.53, 1992.
- 52) A.D'Ursi, M. Pegna, P. Amodeo, H. Molinari, A. Verdini, L. Zetta, P. Temussi, Solution Conformation of Tuftsin, *Biochemistry*, 31, 9581-9586, 1992.

- 53) G. Esposito, F. Fogolari, H. Molinari, M. Pegna, L. Zetta, Proton Strong Coupling in heteronuclear systems. Theoretical and experimental evaluation in quantitative analysis of SQC-NOESY spectra of biopolymers, *J. Magn. Reson.*, B 101, 240-247, 1993.
- 54) G. Esposito, A. M. Lesk, H. Molinari, A. Motta, N. Niccolai and A. Pastore, Probing Protein Structure by Solvent Perturbation of NMR Spectra: II. Determination of Surface and Buried Residues in Homologous Proteins, *Biopolymers*, 33, 839-846, 1993.
- 55) M. Gussoni, F. Greco, R. Consonni, H. Molinari, G. Zannoni, G. Bianchi and L. Zetta, Application of NMR microscopy to the histochemistry study of olives (*Olea Europea L.*), *Magnetic Resonance Imaging*, 11, 259-268, 1993.
- 56) G. Esposito, H. Molinari, M. Pegna, N. Niccolai and L. Zetta, A 1 H NMR study on the interaction of aminoxy paramagnetic probes with unfolded peptides, *Chem. Soc. Perkin Trans. 2*, 1531-1534, 1993.
- 57) H. Molinari, G. Esposito, M. Pegna, A. Motta, N. Niccolai, R. Consonni and L. Zetta The use of spin labels to map protein surfaces, *J. of Cell. Biochem.*, Supplement 17C, 256, 1993.
- 58) M. Gussoni, A. Vezzoli, F. Greco, R. Consonni, M. Pegna, H. Molinari and L. Zetta, A quantitative determination of lactate in muscle by selective excitation NMR spectroscopy, *Quart. Mag. Res. Biol. and Med.*, 1, 9, 1994.
- 59) M. Gussoni, A. Vezzoli, F. Greco, R. Consonni, M. Pegna, H. Molinari and L. Zetta, NMR studies on phantoms for an unequivocal determination of lactate in tissues by 1H NMR spectroscopy, *Quart. Mag. Res. Biol. and Med.* 1, 39, 1994.
- 60) M. Scarselli, G. Esposito, H. Molinari, M. Pegna, L. Zetta, N. Niccolai, The use of paramagnetic probes for NMR investigations of biomolecular structures and interactions, "From Neural Networks and Biomolecular Engineering to Bioelectronics", Plenum Press, New York, 1995.
- 61) S. Improta, H. Molinari, A. Pastore, R. Consonni , L. Zetta, Probing Protein Structure by Solvent Perturbation of NMR Spectra. I. A comparison with photo-CIDNP techniques applied to native a-lactalbumin, *Eur. J. Biochem.*, 227, 78-86, 1995.
- 62) S. Improta, H. Molinari, A. Pastore, R. Consonni , L. Zetta, Probing Protein Structure by Solvent Perturbation of NMR Spectra. II Photo-CIDNP and paramagnetic perturbation techniques applied to the study of the molten globule state of alactalbumin, *Eur. J. Biochem.*, 227, 87-96, 1995.
- 63) R. Consonni, R. Limiroli, H. Molinari, P. Fusi, M. Grisa, M. Vanoni and P. Tortora, 1 HNMR and Photo-CIDNP Spectroscopies show a possible Role for Trp23 and Phe31 in Nucleic Acid Binding by P2 Ribonuclease from the archaeon *Sulfolobus solfataricus*, *FEBS Letters*, 372, 135-139, 1995.
- 64) M. Pegna, H. Molinari, L. Zetta, G. Melacini, W.A. Gibbons, F. Brown, D. Rowlands, E. Chan and P. Mascagni, The Solution Conformational Features of Two Highly Homologous Antigenic Peptides of Foot-and-mouth disease virus serotype A, variant A and USA, Correlate with their Serological Properties, *J. of Peptide Science*, 2, 91-105, 1996.
- 65) M. Pegna, L. Ragona, G. Bravi, H. Molinari, L. Zetta, WA Gibbons, G. Siligardi, F. Brown, D. Rowlands, P. Mascagni, Correlation between the structural properties of five differentFMDV peptides and their serological behavior, *Peptides American Symposium*, 14, 744-748, 1996.
- 66) M. Pegna, H. Molinari, L. Zetta, W.A. Gibbons, F. Brown, D. Rowlands, G. Siligardi and P. Mascagni, The solution structure of the Immunodominant and Cell receptor Binding Regions of Foot-and-mouth disease virus serotype A, variants A, *J. of Peptide Science*, 2, 75-90, 1996.
- 67) L. Ragona, H. Molinari, L. Zetta, R. Longhi, D. Marchini, R. Dallai, L.F. Bernini, M. Scarselli and N. Niccolai, CD and NMR Structural characterization of Ceratotoxins, Natural Peptides with Antimicrobial Activity, *Biopolymers*, 39, 653-664, 1996.
- 68) H. Molinari, L. Ragona, L. Varani, R. Consonni, L. Zetta and H. Monaco, Partially folded structure of monomeric bovine b-Lactoglobulin, *FEBS Letters*, 381, 237243, 1996.
- 69) H.L. Monaco and H. Molinari, Determinazione della struttura tridimensionale delle proteine con la risonanza magnetica nucleare, *BioTec*, 3, 24-32, 1996. 70) M. Scarselli, G. Esposito, H. Molinari, L. Ragona, L. Zetta and N. Niccolai, Solvent Spin-Labelling for NMR Investigations of Protein Folding, *Trends in Chem. Phys.*, 4, 99-110, 1996.
- 71) M. Hamdan, O. Curcuruto, H. Molinari, L. Zetta and L. Ragona, Monitoring complexation between some proteins and naphthalene dye by electrospray mass spectrometry, *J. Mass Spectroscopy*, 31, 1261-1264, 1996.
- 72) H. Molinari, G. Esposito, M. Pegna, L. Ragona, N. Niccolai, R.M. Brunne, A. Lesk and L. Zetta, Probing Protein Structure by Solvent Perturbation of 1H Nuclear Magnetic Resonance Spectra: the Surface Accessibility of BPTI, *Biophys. J.*, 73, 382-396, 1997.
- 73) M. Scarselli, A. Facchiano, G. Russo, H. Molinari, L. Ragona, L. Zetta and N. Niccolai, The design of a specific ligand of HIV gp 120, *J. Peptide Science*, 3, 383-390, 1997.
- 74) R.P. Bonomo, L. Casella, L. DeGioia, H. Molinari, G. Impellizzeri, T. Jordan, G. Pappalardo, R. Purrello and E. Rizzarelli, Metal ion and proton stabilization of turn motif in the synthetic octapeptide L-Histidyl-(Glycyl-L-Histidyl)3-Glycine, *Chem. Soc. Dalton Trans.* , 2387-2389, 1997.
- 75) Carta, A., Sanna, P and H. Molinari, Structural Elucidation of isomeric methyl(E)-3-[5aminobenzotriazol-1(2)(3)-yl] propenoates by NMR Spectroscopy, *Heterocycles*, 45, 1391-1395, 1997.
- 76) L. Ragona, F. Pusterla, L. Zetta, H. Monaco and H. Molinari, Identification of a conserved hydrophobic cluster in partially folded bovine b-Lactoglobulin at pH 2, *Folding and Design*, 2, 281-190, 1997.
- 77) F. Fogolari, L. Ragona, L. Zetta, S. Romagnoli, K.G. De Kruij and H. Molinari, Monomeric bovine b-lactoglobulin adopts a b-barrel fold at pH 2, *FEBS Letters*, 436, 149-154, 1998.
- 78) L. Ragona, L. Confalonieri, L. Zetta, K.G. De Kruij, S. Mammi, E. Peggion, R. Longhi and H. Molinari, Equilibrium unfolding CD studies of bovine b-lactoglobulin and its 14-52 fragment at acidic pH, *Biopolymers*, 49, 441-450, 1999.
- 79) C. Holt & H. Molinari & all the participants to MADGELAS EEC Concerted Action, Apparent chemical composition of nine commercial or semi-commercial whey protein concentrates, isolates and fractions, *Int. J. Food and Science Tec.*, 34, 543-557, 1999.
- 80) C. Holt & H. Molinari & all the participants to MADGELAS EEC Concerted Action, Some physico-chemical properties of nine commercial or semi-commercial whey protein concentrates, isolates and fractions, *Int. J. Food and Science Tec.*, 34, 587602, 1999.

- 81) M. Scarselli, A. Bernini, C. Segoni, H. Molinari, G. Esposito, A.M. Lesk, F. Laschi, P. Temussi and N. Niccolai, Tendamistat Surface Accessibility to the TEMPOL paramagnetic probe, *J. Biomol. NMR*, 15, 125-133, 1999.
- 82) L.Ragona, F. Fogolari, S.Romagnoli,, L. Zetta, J.L. Maubois and H. Molinari, Unfolding and refolding of Bovine beta-Lactoglobulin Monitored by hydrogen exchange measurements, *J. Mol. Biol.*, 293 , 953-969 , 1999.
- 83) F. Fogolari, S. Licciardi, S. Romagnoli, L. Ragona, R. Michelutti, R. Ugolini and H. Molinari, Electrostatic properties of Bovin beta lactoglobulin, *Proteins. Structure, Function and Genetics*, 39, 317-330, 2000.
- 84) L. Ragona, L. Zetta, F. Fogolari, D.M. Perez, P. Pujol, K. De Kruif, F. Lohr, H. Ruterjans and H. Molinari, Bovine b-lactoglobulin:interaction studies with palmitic acid, *Protein Sci.*, 9, 1347-1356, 2000.
- 85) M.A. Zoroddu, T. Kowalik-Jankowska, H. Kozlowski, H. Molinari, K. Salnikow, L. Broday and M. Costa, Interaction of Ni (II) and Cu(II) with a metal binding sequence of histone H4: AKRHRK, a model of the H4 tail, *Biochim. Biophys. Acta*, 1475, 163-8, 2000.
- 86) S. Romagnoli, R. Ugolini, G. Shaller, K. Urech, M. Giannattasio, F. Fogolari, L. Ragona and H. Molinari, NMR Structural Studies of Viscotoxin A3 from Viscum album. *Biochem. J.*, 350, 569-577, 2000.
- 87) F. Fogolari, R. Ugolini, H. Molinari, P. Viglino and G. Esposito, Simulation of Electrostatic Effects in Fab-Antigen Complex Formation, *Eur. J. Biochem.*, 267, 48614869, 2000.
- 88) R. Ugolini, L. Ragona, E. Silletti, F. Fogolari, R.W. Visschers, A.C. Alting and H. Molinari, Dimerisation, stability and electrostatic properties of porcine b-Lactoglobulin, *Eur. J. Biochem.*, 268, 4477-4488, 2001.
- 89) F. Fogolari, G. Esposito, P. Viglino and H. Molinari, Molecular Mechanics and Dynamics of Biomolecules using a Solvent Continuum Model, *J. Comp. Chem.*, 22, 1830-1842, 2001.
- 90) N.Niccolai, A. Ciutti, O. Spiga, M. Scarselli, A. Bernini, L. Bracci, D. Di Maro, C. Dalvit, H. Molinari, G. Esposito and P. A. Temussi, NMR studies of protein surface accessibility, *J. Biol. Chem.*, 276, 42455-42461, 2001.
- 91) F.Fogolari, S.Tessari and H. Molinari, Singular Value Decomposition analysis of protein sequence alignment score data, *Proteins. Structure, Function and Genetics*, 46, 161-170, 2002.
- 92) L. Ragona, M. Catalano, L. Zetta , R. Longhi, F. Fogolari and H. Molinari, Peptide models of folding initiation sites of bovine b-lactoglobulin: identification of native-like hydrophobic interactions involving G and H strands, *Biochemistry*, 41, 2786-2796, 2002.
- 93) F. Fogolari, A. Brigo and H. Molinari, The Poisson-Boltzmann equation for biomolecular electrostatics: a tool for structural biology, *J Mol Recognit.*,15, 377-92, 2002.
- 94) A Bernini, O Spiga, M Scarselli, A Ciutti, D Calamandrei, D Di Maro, H Molinari, M Catalano, I Fiaschi, N Niccolai, Surface accessibility of hen lysozyme, *Italian Journal of Biochemistry*, 51, 1/2, 5.12, 2002.
- 95) F. Vasile, L. Ragona, M. Catalano, L. Zetta, M. Perduca, H. Monaco and H. Molinari, Solution structure of chicken liver basic type fatty acid binding protein, *J. Biomol. NMR* , 25, 157-160, 2003.
- 96) M. Catalano, L. Ragona, H. Molinari, A. Tava, and L. Zetta, Solution structure of a Bowman Birk Inhibitor isolated from snail medic seeds (*Medicago Scutellata*) showing anticarcinogenic activity and analysis of self-association behaviour, *Biochemistry*, 42, 2836-2846, 2003.
- 97) M. Berrera, H. Molinari and F. Fogolari, Amino acid empirical contact energy definitions for fold recognition in the space of contact maps, *BMC Bioinformatics*, 4, 8, 2003.
- 98) F. Fogolari, A. Brigo and H. Molinari, Protocol for MM/PBSA molecular dynamics simulations of proteins, *Biophys. J.*, 85, 159-66, 2003.
- 99) M.Collini, L. D'Alfonso, G. Baldini, M. Catalano, L.Ragona and H. Molinari, Competitive binding of fatty Acids and the fluorescent probe 1-8-anilinonaphthalene sulfonate to bovine beta-lactoglobulin, *Protein Sci.*, 12, 1596-603, 2003.
- 100) N. Niccolai, O. Spiga, A. Bernini, M. Scarselli, A. Ciutti, I. Fiaschi, H. Molinari and P. Temussi, NMR Studies of Protein Hydration and TEMPOL Accessibilità, *J. Mol. Biol.* 332, 437-47, 2003.
- 101) L. Ragona, M. Catalano , R. Ugolini, F. Fogolari, L. Zetta and H. Molinari, EF loop conformational change triggers ligand binding in beta-lactoglobulins, *J. Biol. Chem.*, 278, 38840, 2003.
- 102) S. Romagnoli, F. Fogolari, M. Catalano, L. Zetta, K. Urech, M. Giannattasio, L. Ragona and H. Molinari, NMR solution structure of a newly isolated Viscotoxin C1 from *Viscum album* L.: towards a structure-function analysis of viscotoxin isoforms, *Biochemistry*, 42, 12503-10, 2003.
- 103) Bonora, G.M., Fattorusso, R. and Molinari, H., Chimica, NMR e Biologia Strutturale, La Chimica e l'Industria- 10, 41-42, 2003.
- 104) S. Brocca, E. Pedrazzoli, L. Ragona, M. Catalano H. Molinari and M. Lotti, Heterologous expression of bovine and porcine b-lactoglobulins in *Pichia pastoris*:towards a comparative functional characterization, *J. Biotechnol.*, 109, 169178, 2004.
- 105) L. D'Alfonso, M. Collini, L. Ragona, R. Ugolini, G. Baldini and H. Molinari, Porcine beta-lactoglobulin chemical unfolding: identification of a non native a-helical intermediate. *Proteins*, 58, 70-79, 2005.
- 106) L. Ragona, G. Colombo, M. Catalano and H. Molinari, Determinants of protein stability and folding: comparative analysis of beta-lactoglobulins and liver basic fatty acid binding protein, *Proteins*, 61, 366-76, 2005.
- 107) F. Fogolari, E. Moroni, M. Woiczechowski, M. Baginski, L. Ragona, H. Molinari, MM/PBSA analysis of molecular dynamics simulations of bovine b-lactoglobulin: free energy gradients in conformational transitions, *Proteins*, 59, 366-76, 2005.
- 108) G. Invernizzi, M. Samalikova, S. Brocca, M. Lotti, H. Molinari and R. Grandori, Comparison of bovine and porcine beta-lactoglobulin: a mass spectrometric approach, *J. Mass. Spectr.*, 41, 717-27, 2006.
- 109) L. Ragona, M. Catalano, M. Luppi, D. Cicero, T. Eliseo, J. Foote, F. Fogolari, L. Zetta, and H. Molinari, NMR Dynamic studies suggests that allosteric activation regulates ligand binding in chicken liver bile acid binding protein, *J. Biol. Chem.* 281, 9697-709, 2006.
- 110) S. Tomaselli, L. Ragona, L. Zetta, M. Assfalg, P. Ferranti, R. Longhi, A.M.J.J. Bonvin, H. Molinari, NMR-based modelling and binding studies of a ternary complex between chicken liver bile acid binding protein and bile acids, *Proteins*, 69(1):177-91, 2007.

- 111) T. Eliseo, L. Ragona, M. Catalano, M. Assfalg ,M. Paci, L. Zetta, H. Molinari and D.O. Cicero, Structural and dynamic determinants of ligand binding in the ternary complex of chicken liver bile acid binding protein with two identical bile salts revealed by NMR, *Biochemistry*, 46(44):12557-67, 2007.
- 112) M. Assfalg, E. Gianolio, S. Zanzoni, S. Tomaselli, V.L Russo,C. Cabella, L. Ragona, S. Aime and H. Molinari, NMR structural studies of a novel complex between a liver cytosolic bile acid binding protein and Gd(III)/bile acids conjugates: molecular determinants of binding in hepatospecific contrast agent, *J. Med. Chem.*, 50(22):5257-68, 2007.
- 113) I.Eberini, A. Guerini Rocco, A.R. Ientile, A.M. Baptista, E. Gianazza, S. Tomaselli, H. Molinari and L. Ragona, Conformational and dynamics changes induced by bile acids binding to chicken liver bile acid binding protein, *Proteins*, 71(4):1889-98.2008.
- 114) M. Guariento, D. Raimondo, M. Assfalg, S. Zanzoni, P. Pesente, L. Ragona, A. Tramontano and H. Molinari, Identification and functional characterization of the bile acid transport proteins in non-mammalian ileum and mammalian liver, *Proteins*, 70(2):462-72, 2008.
- 115) S. Tomaselli, S. Zanzoni, L. Ragona, E. Gianolio, S. Aime, M. Assfalg and H. Molinari, Solution structure of the supramolecular adduct between a liver cytosolic bile acid binding protein and a bile acid-based Gadolinium(III)-chelate, a potential hepatospecific magnetic resonance imaging contrast agent, *J. Med. Chem.*, 51 (21), 6782-6792, 2008.
- 116) M. D'Onofrio, L. Ragona, D. Fessas, M. Signorelli, R. Ugolini, M. Pedò, M. Assfalg and H. Molinari, NMR unfolding studies on a liver bile acid binding protein reveal a global two-state unfolding and localized singular behaviors, *Arch. Biophys. Biochem.*, 481 (1),21-9, 2009.
- 117) M. Assfalg, M D'Onofrio, M. Pedò, S. Zanzoni, C. Cogliati, M. Guariento, H. Molinari, Binding cooperativity and allosterism make liver fatty acid binding proteins ideal chaperones of lipids and lipid-functionalized drugs, *FEBS J.*, 276, 129, 2009.
- 118) M.Pedo, M. D'Onofrio, P. Ferranti, H.Molinari, M.Assfalg, Towards the elucidation of molecular determinants of cooperativity in the liver bile acid binding protein, *Proteins*, 77(3):718-31, 2009.
- 119) C.Cogliati, S.Tomaselli, M.Assfalg, M.Pedo, P.Ferranti, L.Zetta, H.Molinari, L Ragona, Disulfide bridge regulates ligand-binding site selectivity in liver bile acidbinding proteins, *FEBS J.*, 276 (20), 6011-23, 2009.
- 120) M. Pedò, F. Löhr, M. D'Onofrio, M. Assfalg, V. Dötsch, H. Molinari, NMR studies reveal the role of biomembranes in modulating ligand binding and release by intracellular bile acid binding proteins, *J. Mol. Biol.* Dec 18;394(5):852-63, 2009.
- 121) M. Guariento, M. Assfalg, S. Zanzoni, D. Fessas, R. Longhi, H. Molinari, Chicken ileal bile acid binding protein: a promising target of investigation to understand binding cooperativity across the protein family, *Biochem. J.*, 425(2):41324, 2010.
- 122) Cogliati C, Ragona L, D'Onofrio M, Günther U, Whittaker S, Ludwig C, Tomaselli S, Assfalg M, Molinari H. Site-specific investigation of the steady-state kinetics and dynamics of the multistep binding of bile acids molecule to a lipid carrier protein, *Chemistry, A European Journal*, 16 (37):11300-10, 2010.
- 123) Zanzoni S, Assfalg M, Giorgetti A, D'Onofrio M, Molinari H. Structural requirements for cooperativity in ileal bile acid binding proteins, *J. Biol. Chem.* 286 (45) 39307-17, 2011.
- 124) Assfalg, M., Bortoletti E, D'Onofrio M, Pigozzi R, Molinari H, Boner, A. L, Peroni, D G and Piacentini G. L., An exploratory (1)H-nuclear magnetic resonance metabolomics study reveals altered urine spectral profiles in infants with atopic dermatitis, *British J. of Dermatology*, 166 (5) 1123-5, 2012.
- 125) Tomaselli, S., Assfalg, M., Pagano, K., Cogliati, C., Zanzoni, S., Molinari, H., L. Ragona, A disulphide brifge determines the rotameric state of key amino-acid sidechains, inducing site selective binding in liver bile acid binding proteins, *Chemistry, A European Journal*, 18, 10, 2857-2866, 2012.
- 126) Napoli, C, Sperandio, N. Lawlor, R T, Scarpa, A. Molinari, H and Assfalg, M., Urine metabolic signature of pancreatic ductal adenocarcinoma by (1)H nuclear magnetic resonance: identification, mapping, and evolution, *J. Proteome Res.* 11 (2), 1274-83, 2012.
- 127) Eberini, I., Sensi, C., Bovi, M., Molinari, H., Galliano, M., Bonomi, F., Iametti, S.,Gianazza, E., Wards in the keyway: amino acids with anomalous pK (a)s in calycins, *Amino Acids*, 43, 6,2457-2468, 2012.
- 128) D'Onofrio, M., Gianolio, E., Ceccon, A., Arena, F., Zanzoni, S., Fushman, D., Aime, S., Molinari, H., Assfalg, M., High Relaxivity Supramolecular Adducts Between Human-Liver Fatty Acid-Binding Protein and Amphiphilic Gd(III) Complexes: Structural Basis for the Design of Intracellular Targeting MRI Probes, *Chemistry, A European Journal*, 18 (32), 9919-9928, 2012.
- 129) Zanzoni, S., D'Onofrio, M., Molinari, H., Assfalg, M., Recombinant proteins incorporating short non-native extensions may display increased aggregation propensity as detected by high resolution NMR spectroscopy, *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 427, 3, 677-681, 2012.
- 130) Favretto, F., Assfalg, M., Molinari, H., D'Onofrio, M., Evidence from NMR interaction studies challenges the hypothesis of direct lipid transfer from L-FABP to malaria sporozoite protein UIS3, *Protein Sci.*, 22, 2 , 133-138, 2013.
- 131) Favretto, F., Assfalg, M., Gallo, M. Cicero, D.O., D'Onofrio, M. and Molinari, H., Ligand binding promiscuity of human liver fatty acid binding protein: structural and dynamic insights from an interaction study with glycocholate and oleate, *ChemBioChem*, 14, 1807-1819, 2013.
- 132) Santambrogio, C., Favretto, F., D'Onofrio, M., Assfalg, M., Grandori, R. and Molinari, H., Mass spectrometry and NMR analysis of ligand binding by human liver fatty acid binding protein *J. Mass Spectrom.*, 48, 895-903, 2013.
- 133) Tomaselli, S., Giovanella, U. Pagano, K., Leone, G., Zanzoni, S.,Assfalg, M., Meinardi, F., Molinari, H., Botta, C. and Ragona, L., Encapsulation of a rhodamine dye within a bile acid binding protein: toward water processable functional bio hostguest materials, *Biomacromolecules*, 14, 3549-3556, 2013.
- 134) Pagano, K., Tomaselli, S., Zanzoni, S., Assfalg, M., Molinari, H. and Ragona, L., Bile Acid Binding Protein: A versatile host of small hydrophobic ligands for applications in the field of MRI contrast agents and bionanomaterials, *Comput. Struct. Biotech. J*, 6, 7, 2013.

- 135) Ceccon, A., D'Onofrio, M., Zanzoni, S., Longo, D. L., Aime, S., Molinari, H., Assfalg, M., NMR investigation of the equilibrium partitioning of a water-soluble bile salt protein carrier to phospholipid vesicles, *Proteins*, 81, 10, 1776-91, 2013.
- 136) Smal, C., Zanzoni, S., D'Onofrio, M., Molinari, H., Cicero, D.O., Assfalg, M., (1)H, (15)N and (13)C chemical shift assignments of the C-Ala domain of the alanyl-tRNA synthetase of the psychrophilic bacterium *Bizionia argentinensis* sp. Nov, *Biomol NMR Assign.*, 8 (2014) 415-418.2014.
- 137) A. Bernini, L. Henrici De Angelis, E. Morandi, O. Spiga, A. Santucci, M. Assfalg, H. Molinari, S. Pillozzi, A. Arcangeli, N. Niccolai, Searching for protein binding sites from Molecular Dynamics simulations and paramagnetic fragment-based NMR studies, *Bioch. Biophys. Acta*, 1844 561-566, 2014.
- 138) Longo, E. Di Gregorio, R. Abategiovanni, A. Ceccon, M. Assfalg, H. Molinari, S. Aime, Chemical exchange saturation transfer (CEST): an efficient tool for detecting molecular information on proteins' behaviour, *Analyst*, 139, 2687-2690, 2014.
- 139) L. Ragona, K. Pagano, S. Tomaselli, F. Favretto, A. Ceccon, S. Zanzoni, M. D'Onofrio, M. Assfalg, H. Molinari, The role of dynamics in modulating ligand exchange in intracellular lipid binding proteins, *Bioch. Biophys. Acta*, 1844, 1268-1278, 2014.
- 140) A. Ceccon, M. Lelli, M. D'Onofrio, H. Molinari, M. Assfalg, Dynamics of a globular protein adsorbed to liposomal nanoparticles, *J. Am. Chem. Soc.*, 136, 1315813161, 2014.
- 141) S. Tomaselli, K. Pagano, S. Boulton, S. Zanzoni, G. Melacini, H. Molinari and L. Ragona, Lipid binding protein response to a bile acid library: a combined NMR and statistical approach, *FEBS J.*, 282 (21) 4094-4113, 2015.
- 142) F. Favretto, A. Ceccon, S. Zanzoni, M. D'Onofrio, L. Ragona, H. Molinari, M. Assfalg, The unique ligand binding features of subfamily-II iLBPs with respect to bile salts and related drugs, *PLEFA*, 95, 1-10, 2015.
- 143) F. Favretto, C. Santambrogio, M. D'Onofrio, H. Molinari, R. Grandori and M. Assfalg Bile salt recognition by human liver fatty acid binding protein, *FEBS J.*, 282 (7) 1271-1288, 2015.
- 144) M. Assfalg, L. Ragona, K. Pagano, M. D'Onofrio, S. Zanzoni, S. Tomaselli and H. Molinari, The study of transient protein–nanoparticle interactions by solution NMR spectroscopy, *Bioch. Biophys. Acta*, 1864 (1), 102-114, 2016.
- 145) S. Tomaselli, D.O. Ramirez, R.A. Carletto, A. Varesano, C. Vineis, S. Zanzoni, H. Molinari, and L. Ragona, Electrospun Lipid Binding Proteins Composite Nanofibers with Antibacterial Properties, *Macromol Biosci.*, 17 (4), 1600300-6 2017.
- 146) Tomaselli S, Pagano K, D'Arrigo C, Molinari H, Ragona L. Evidence of Molecular Interactions of A $\beta$ 1-42 with N-Terminal Truncated Beta Amyloids by NMR, *ACS Chem. Neurosci.*, 8 (4), 759-765, 2017.
- 147) Zanzoni S, Pagano K, D'Onofrio M, Assfalg M, Ciambellotti S, Bernacchioni C, Turano P, Aime S, Ragona L, Molinari H. Unsaturated long chain fatty acids are preferred ferritin ligands enhancing iron biominerilization. *Chemistry, A European Journal*, 23 (41) 9879-9887, 2017.
- 148) Ragona, L., Gasymov, O., Guliyeva, A. J., Aslanov, R. B., Zanzoni, S., Botta, C., Molinari, H., Rhodamine binds to silk fibroin and inhibits its self-aggregation, *Bioch. Biophys. Acta*, 1866 (5-6), 661-667, 2018
- 149) Pagano, K., Galante, D., D'Arrigo, C., Corsaro, A., Nizzari, M., Florio, T., Molinari, H., Tomaselli, S., Ragona, L., Effects of Prion Protein on Abeta42 and Pyroglutamate-Modified AbetaEpsilon3-42 Oligomerization and Toxicity, *Mol. Neurobiol.*, 56 (3), 1957-71, 2019
- 150) Gasymov, O.K., Botta, C., Ragona, L., Guliyeva, A.J., Molinari, H., Silk fiboin-based Films Enhance Rhodamine 6G emission in the solid state: A Chemical-Physical Analysis of their Interactions for the design of Highly Emissive Biomaterials, *Macromol. Chem. Phys.*, 220 (4), 1800460, 2019
- 151) Pagano, K., Paolino, M., Fusi, S., Zanirato, V., Trapella, C., Giuliani, G., Cappelli, A., Zanzoni, S., Molinari, H., Ragona, L., Olivucci, M. Bile Acid Binding Protein Functionalisation Leads to a Fully Synthetic Rhodopsin Mimic, *J. Phys. Chem. Lett.*, 10(9), 2235-43, 2019
- 152) Tomaselli, S., La Vitola, P., Pagano, K., Brandi, E., Santamaria, G., Galante, D., D'Arrigo, C., Moni, L., Lambruschini, C., Banfi, L., Lucchetti, J., Fracasso, C., Molinari, H., Forloni, G., Balducci, C., Ragona, L., Biophysical and in Vivo Studies Identify a New Natural-Based Polyphenol, Counteracting Abeta Oligomerization in Vitro and Abeta Oligomer-Mediated Memory Impairment and Neuroinflammation in an Acute Mouse Model of Alzheimer's Disease, *ACS Chem. Neurosci.*, 10 (11), 4462-75, 2019

**TRATTAMENTO DEI DATI  
PERSONALI, INFORMATIVA E  
CONSENTO**

Il D.Lgs 30/06/2003, n. 196 "Codice in materia di protezione dei dati personali" regola il trattamento dei dati personali, con particolare riferimento alla riservatezza, all'identità personale e al diritto di protezione dei dati personali; l'interessato deve essere previamente informato del trattamento.

La norma in considerazione intende come "trattamento" qualunque operazione o complesso di operazioni concernenti la raccolta, la registrazione, l'organizzazione, la conservazione, la consultazione, l'elaborazione, la modifica, la selezione, l'estrazione, il raffronto, l'utilizzo, l'interconnessione, il blocco, la comunicazione, la diffusione, la cancellazione e la distruzione di dati, anche se non registrati in una banca dati.

In relazione a quanto riportato, autorizzo il CNR al trattamento dei dati contenuti nel presente *curriculum vitae* e nella documentazione della quale fa parte integrante, sollevandolo da ogni responsabilità e autorizzandolo alla pubblicazione, sul sito web del CNR, della relazione inerente alle proprie ricerche svolte nell'ambito del Progetto finanziato dal CNR. Inoltre acconsento all'aggiornamento delle informazioni intranet che mi riguardano sia relative le pubblicazioni sia alle ricerche svolte.

*The Undersigned hereby authorises the CNR to utilize and store the personal sensitive data contained in the attached Curriculum Vitae for the purposes of bilateral Joint research projects and within the framework of the Data protection Act No. 196, dates 30 June 2003 as promulgated by the Italian Government.*

( barrare la casella)

Si, acconsento