

Curriculum vitae: Henriette Molinari

Informazioni Personali

Luogo e Data di nascita: Milano il 19/11/1952;

Titolo di studio

H. Molinari si è laureata in Chimica (laurea vecchio ordinamento) presso l'Università di Milano nel 1976.

Voto 110/110 e lode

Titolo della tesi: Sintesi e caratterizzazione di catalizzatori di trasferimento di fase ancorati a matrici polimeriche, Relatore: Prof. Fernando Montanari

Posizioni ricoperte

1976-1978 Borsista CNR presso il Dipartimento di Chimica Industriale dell'Università degli Studi di Milano.

Tematica di ricerca: Sintesi e caratterizzazione di catalizzatori di trasferimento di fase ancorati a matrici polimeriche

1978 al 1980 Post-Doc presso il Dyson Perrins Laboratory dell'Università di Oxford. Supervisore: Prof. J.M. Brown

Tematica di ricerca: Sintesi e caratterizzazione spettroscopica mediante NMR di catalizzatori metallorganici ancorati a matrici polimeriche.

1981 Ricercatrice Confermata (C05X) presso l'Università di Milano.

Tematica di ricerca: Sintesi, caratterizzazione spettroscopica e impiego in sintesi asimmetriche di poli-alfa amminoacidi sintetici.

1986-1988 Vincitrice di borse di studio CNR-NATO ed Accademia dei Lincei per un periodo di ricerca presso Queen Mary College, University of London.

Tematica di ricerca: Studio di nuove metodologie NMR per l'osservazione di nuclei con bassa abbondanza isotopica

1989 Vincitrice di borsa di studio EMBO (European Molecular Biology Organisation) presso EMBL Heidelberg.

Tematica di ricerca: Caratterizzazione strutturale mediante NMR e simulazioni di dinamica molecolare di peptidi e proteine.

1991 Vincitrice concorso Professore Associato (CHIM/06) presso l'Università degli Studi di Sassari, Facoltà di Farmacia, dove ricopre il corso di Chimica Organica.

1992 Vincitrice concorso per trasferimento presso l'Università degli Studi di Verona di nuova costituzione, Corso di Laurea in Biotecnologie Agro-Industriali, dove ricopre i corsi di Chimica Organica (CHIM/06) e Biopolimeri e Analisi NMR.

2003 Vincitrice concorso di idoneità a Professore di prima fascia nel raggruppamento CHIM/06.

2004-2012 Professore Ordinario presso l'Università degli Studi di Verona

1/12/2012 in quiescenza in seguito a dimissioni volontarie dall'Università degli Studi di Verona. Tali dimissioni sono state motivate dalla fatica del pendolarismo giornaliero Milano-Verona, che ha

comportato 4 ore giornaliere di trasporti a partire dal 1992.
1/1/2013-oggi Associata di ricerca presso il Laboratorio NMR di ISMAC CNR
Milano (dal 1989 al 2006 già aveva usufruito di incarico di ricerca
gratuito presso lo stesso Istituto CNR).

Descrizione delle tematiche ricerca

Le tematiche di ricerca sviluppate presso l'Università degli Studi di Verona dove ha costituito e diretto il Laboratorio di NMR ed il Laboratorio per la preparazione di proteine isotopicamente arricchite hanno riguardato:

- i) determinazione strutturale di biomolecole, mediante NMR e simulazioni di dinamica molecolare;
- ii) studio dei meccanismi del folding delle proteine;
- iii) studio delle interazioni proteina-lipide,
- iv) studio NMR dell'interazione tra nanoparticelle e proteine
- v) studio NMR di sistemi oligomerici ad alto peso molecolare e loro interazioni per lo sviluppo di nuovi materiali

Gli studi di chimica strutturale si sono orientati allo studio di proteine ricche in ponti disolfuro con attività antitumorale, e proteine trasportatrici di lipidi appartenenti alla superfamiglia delle calicine. In particolare ha studiato le proprietà strutturali, di legame e le proprietà di folding di beta-lattoglobulina bovina, la proteina più abbondante del siero del latte. Nell'ambito delle ricerche su questa proteina ha partecipato ad un progetto europeo (vedi Progetti finanziati). Ha studiato proteine intracellulari trasportatrici di lipidi, che giocano un ruolo fondamentale nell'omeostasi del colesterolo e degli acidi biliari e sono un importante target nello studio del diabete e delle malattie cardiovascolari. Ha inoltre approfondito lo studio di tali proteine quali trasportatrici di agenti di contrasto epatospecifici disegnati a partire da acidi biliari modificati. Ha svolto una collaborazione con un consorzio argentino per la ricerca, caratterizzazione e valutazione dell'attività biologica di proteine attive a bassa temperatura da organismi dell'Antartide, per lo sviluppo di proteine per applicazioni biotecnologiche. Ha sviluppato una linea di ricerca nell'ambito dell'NMR applicato alla nanomedicina, studiando in particolare la dinamica e l'interazione di proteine con nanoparticelle tramite nuove metodologie NMR per l'osservazione di specie NMR invisibili ad alto peso molecolare. Recentemente ha approfondito lo studio NMR di specie oligomeriche ad alto peso molecolare, quali la ferritina e le sue interazioni con acidi grassi, tramite l'applicazione di misure NMR di diffusione.

Ha condotto studi di metabolomica mediante NMR su biofluidi organici.

In ambito più applicativo ha studiato l'interazione di proteine trasportatrici con coloranti sia in soluzione che allo stato solido, per lo sviluppo di materiali per l'optoelettronica. Nell'ambito di un progetto bilaterale CNR con Azerbaijan di cui è coordinatrice sta sviluppando lo studio dell'interazione di coloranti organici ed altri materiali con la fibroina della seta, per lo sviluppo di nuovi materiali biocompatibili per applicazioni sia nell'ambito dell'optoelettronica che della nanomedicina.

Ha presentato conferenze plenarie su invito in numerose conferenze nazionali e internazionali.

Organizzatrice di Scuole e Convegni nazionali e internazionali

Presenta 144 pubblicazioni su riviste scientifiche internazionali ed è editrice ed autrice di un libro "NMR and Biological Structure" VCH, 1991 Editori: I. Bertini, H. Molinari, N. Niccolai.

H-index (da Google Scholar) **35**; **i10-index**: **79**

Premi

Nel **2005** ha ricevuto la medaglia GIDRM (Gruppo Italiano di Discussione per le Risonanze Magnetiche) e GIRM (Gruppo interdivisionale delle Risonanze Magnetiche) per l'attività svolta nel campo 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.

Principali incarichi ricoperti

1989 invitata a partecipare al Summer Visitor Program dell'European Molecular Biology di Heidelberg.

1996-2000 membro del direttivo del GIDRM (Gruppo Italiano di Discussione delle Risonanze Magnetiche) e del Direttivo del GIRM (Gruppo Interdivisionale SCI per le Risonanze Magnetiche).

2000-2003 Presidente della Divisione di Chimica dei Sistemi Biologici della Società Chimica Italiana.

2001-2004 eletta nel Consiglio di Amministrazione dell'Università di Verona.

2004 rappresentante della SCI per il Working Group in Chemistry for Life Science (EuCheMS)

2005-2007 Presidente del Consiglio di Corso di laurea in Biotecnologie Agro-Industriali (UNIVR).

2006-2012 Rappresentante degli utenti nell'ambito delle infrastrutture NMR dell'Unione Europea (VI e VII Programma quadro)

2007-2010 eletta nel Consiglio di Amministrazione dell'Università di Verona

2008 membro del working group O all'interno della roadmap per l'infrastruttura europea INSTRUCT

2009-oggi membro dell' Editorial Board di Biochimica Biophysica Acta

2010-2012 eletta nel Consiglio di Amministrazione dell'Università di Verona

2010-2013 Eletta Presidente del Gruppo Italiano di Discussione per le Risonanze Magnetiche (GIDRM)

2013-2016 Ri-eletta Presidente del Gruppo Italiano di Discussione per le Risonanze Magnetiche (GIDRM)

Esperienze di valutazione

2011 Selezionata quale componente GEV-ANVUR VQR 2004-2010 Sub-GEV area 3 Chimica

2012-2014 Membro della commissione per Abilitazione Scientifica Nazionale per SSD CHIM06

2014-2015 nominata "panel member" dell'European Research Council (ERC) per l'assegnazione di "Starting Grant"

2015 Selezionata quale componente GEV-ANVUR VQR 2011-2014 Sub-GEV area 3 Chimica

2016 Nominata nel Comitato di Selezione (CdS) incaricato della

valutazione dei Progetti PRIN 2015 per l'area Life Science Settore ERC: LS1

- 2016** incaricata di costituire lo "user panel" per la valutazione dell'accesso all'infrastruttura europea iNEXT, (H2020 project #653706) la prima infrastruttura di ricerca che permette l'accesso combinato a diverse tecnologie per la biologia strutturale.
- 2016** nominata "panel member" dell' European Research Council per le valutazioni **2017** degli "Starting Grant"

Progetti di ricerca finanziati

- 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).
- 1996** Progetto europeo triennale per l'accesso alle "Large Scale Facilities" del Biophysic Centre di Francoforte, "Structural Characterization of the acidic form of bovine b-Lactoglobulin and study of its interactions with hydrophobic ligands".
- 1998** MURST progetto di ricerca ex quota 40%, "Studi strutturali su proteine che legano molecole idrofobiche", Coordinatrice locale.
- 2000** MURST progetto di ricerca ex quota 40%, "Studi strutturali su proteine che legano molecole idrofobiche", Coordinatrice locale.
- 2000** Progetto europeo biennale per l'accesso alle "Large Scale Facilities" del Biophysic 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 Viscum album".
- 2002** Progetto PAIS-INFM in collaborazione con Prof. Baldini "Caratterizzazione biofisica di lipocaline"
- 2002** 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". Coordinatrice locale
- 2002** 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", Coordinatrice nazionale.
- 2003** Grant dal Consorzio Siena Ricerche per il progetto "Proteine ricche in ponti disolfuro con attività antitumorale"
- 2004** 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". Coordinatrice locale
- 2005** Programma di scambio culturale Italia-India "NMR structural and functional studies of glycodelin: angiogenic and immunomodulating properties and their role in tumor development". Coordinatrice nazionale
- 2007** Grant Università di Verona e Cariverona per l'acquisto di uno spettrometro NMR operante a 600 MHz dotato di cryoprobe

- 2007 Grant Regione Veneto "Progetto Nanomedicina: NMR applicato alle nanotecnologie" per l'acquisto di uno strumento di Dynamic Light Scattering
- 2009 Partecipante al PRIN finanziato (coordinato dal Prof. Roberto Bassi) "Studi funzionali e strutturali sul sistema di fotoprotezione integrato costituito dal ciclo delle xantofille e la dissipazione non-fotochimica dell'energia."
- 2011 Coordinatrice di un Joint Project finanziato con Novartis "Studi strutturali di NMR sul meccanismo di assemblaggio dei pili nello Streptococco agalactiae Gram-positivo
- 2016 Coordinatrice progetto bilaterale CNR Italia-Azerbaijan "Caratterizzazione delle proprietà strutturali e fotofisiche di biomateriali tramite EPR, FT-IR, spettroscopie Raman confocale ed NMR"

Marta T. Pao

Marta 27 giugno 2016

Lista pubblicazioni Henriette MOLINARI

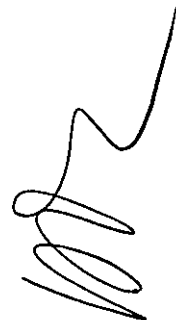
- 1) Cinquini, S. Colonna, H. Molinari, F. Montanari, P. Tundo, Heterogeneous Phase-Transfer Catalysts: Onium Salts, Crown Ethers and Cryptands Immobilized on Polymer Supports, **J.C.S. Chem. Comm.**, 394, 1976.
- 2) H. Molinari, F. Montanari, P. Tundo, Heterogeneous Phase-Transfer Catalysts: High Efficacy 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-Phosphine 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 α -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 Toluene-Water-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 α, β -Epoxy Alcohols, **Synth. Commun.**, **13**, 901, 1983.
- 10) S. Banfi, M. Cinquini, S. Colonna, H. Molinari, Synthesis of α -Aminoacids from Amidocyanoacetates, **Patent n. 22917**, 1983.
- 11) S. Banfi, M. Cinquini, S. Colonna, H. Molinari, Synthesis of α -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- α -Aminoacids 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 $\{[Re_3(u-H)_3(CO)_{10}]_2(u_4-n^2-NO)]^-$ 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 -hydrido)decacarbonyl-triangulo-trirhenate(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 $[Re_3(u-H)_4(CO)_{10}]^-$, **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 β -Hydroxythioacetamides mediated by Enantiomerically Pure Sulphonyl Derivatives, **Tetrahedron**, **41**, 4929, 1985.

- 20) E.M. Beccalli, A. Marchesini, H. Molinari, The Vilsmeier-Haack Reaction with 3,4-Disubstituted Isosazolin-5-ones. A New Synthesis of 1,3-Oxazin-6-Ones and 1,3-Oxazine-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 $[\text{Re}_3(\text{CO})_{10}\text{H}_3]^{2-}$, including an Example of the Rotation of a Re=Re Fragment on $\text{ReH}(\text{CO})_4$, **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 $[\text{Re}_3(\text{m-H})_4(\text{CO})_{10}]^-$ with Me_3NO . Synthesis and Spectroscopic Characterisation of the Adduct Anion $[\text{Re}_3(\text{m-H})_3(\text{CO})_9(\text{m}_3\text{O}\cdots\text{H}\cdots\text{NMe}_3)]^-$ 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}C and ^1H 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 $[\text{Re}_3(\mu\text{H})_4(\text{CO})_9 \text{L}]$ (L=neutral two-electron donor ligand). X-Ray crystal and molecular structures of the tetraethylammonium salts of the anions with 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 $[\text{Re}_3(\text{m-H})_3(\text{m}_3\text{-}\eta^2\text{CH}_2\text{O})(\text{CO})_9]^{2-}$, **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 (12.5.5.5^{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 $[\text{Re}_3(\text{u-H})_3(\text{m}_3\text{-H})_2(\text{CO})_{12}]^-$ **J.C.S. Chem. Comm.**, 486, 1987.
- 31) T. Beringhelli, G. D'Alfonso, H. Molinari, Relaxation Studies of Carbonyl Rhenium Clusters. Part 3. ^{13}C NMR Study of the Properties of the Unsaturated Anion $[\text{Re}_3(\text{m-H})_4(\text{CO})_9(\text{NCMe})]^-$ 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 $\text{Re}_2(\text{CO})_{10}$ with Bases. X-Ray Crystal Structure of the Anion $[\text{Re}_2\text{H}_2(\text{m-H})(\text{CO})_8]^-$, **Organometallics**, **6**, 1365, 1987.
- 33) G.E. Hawkes, L. Lian, H. Molinari and S. Singh, ^{15}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 $[\text{Re}_3(\text{m-H})_4(\text{CO})_9(\text{NCMe})]$, **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 $[\text{Re}_7(\text{m-H})\text{C}(\text{CO})_2]^{2-}$. The Problematic Existence of triply Bridging Hydrides in Clusters Containing Interstitial 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 $[\text{Re}_7\text{H}_2\text{C}(\text{CO})_2]^-$, **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}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 $\text{BF}_3 \cdot \text{Et}_2\text{O}$: 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, ^1H and Natural Abundance ^{15}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 ^1H - ^1H Correlation and ^1H - ^{13}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 $[\text{Re}_6(\text{mH})(\text{mCO})(\text{CO})_18]^{1-}$. **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 ^1H NMR study on the interaction of aminoxyl 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 α -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 α -lactalbumin, **Eur. J. Biochem.**, **227**, 87-96, 1995.
- 63) R. Consonni, R. Limiroli, H. Molinari, P. Fusi, M. Grisa, M. Vanoni and P. Tortora, ^1H -NMR 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, W.A. Gibbons, G. Siligardi, F. Brown, D. Rowlands, P. Mascagni, Correlation between the structural properties of five different FMDV 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**, 237-243, 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-Labeling 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 Spectrometry**, **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 BPT1, **Biophys. Journal**, **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-[5-aminobenzotriazol-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 Kruif 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 Kruif, 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**, 587-602, 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 Bovine 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, **Biochimica et Biophysica 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**, 4861-4869, 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. of Computational 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 Accessibility, **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 viscotoin 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**, 169-178, 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 α -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. Woicjehowski, 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. Pedro, S. Zanzoni, C. Cogliati, M. Guariento, H. Molinari, Binding cooperativity and allostereism 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 acid-binding 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.**, Dec 23;425(2):413-24, 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**, 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, **THE BRITISH JOURNAL OF DERMATOLOGY**, 166 (5) 1123-5, 2012.
- 125) Tomaselli, S., Assfalg, M., Pagano, K., Cogliati, C., Zanzoni, S., Molinari, H., L. Ragona, A disulphide bridge determines the rotameric state of key amino-acid side-chains, inducing site selective binding in liver bile acid binding proteins, **CHEMISTRY**, 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, **JOURNAL OF PROTEOME RESEARCH**, 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., Cecon, 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**, 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, **BIOCHEMICAL AND BIOPHYSICAL RESEARCH COMMUNICATIONS**, 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 SCIENCE**, 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., Giovannella, 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 host-guest 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, **COMPUTATIONAL AND STRUCTURAL BIOTECHNOLOGY JOURNAL**, 6, 7, 2013.
- 135) Cecon, 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. Cecon, M. Assfalg, H. Molinari, S. Aime, Chemical exchange saturation transfer (CEST): an efficient tool for detecting

- molecular information on proteins' behaviour, **THE 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, 13158-13161, 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.

Assfalg

Relato 27 giugno 2016