

Curricula dei candidati per il Consiglio di Presidenza AIC triennio 2012-2014 (in ordine alfabetico)

Tesoriere:

Gianluca CROCE

Data di nascita: Alessandria, 03 Gennaio 1976; Indirizzo: Università del Piemonte Orientale, Viale T. Michel, 11; 15121 Alessandria. Mail: gianluca.croce@mfu.unipmn.it
Website: <http://people.unipmn.it/gcroce>

Assunto dal 2006 presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie Avanzate -Università del Piemonte Orientale A. Avogadro (sede di Alessandria), con la qualifica di tecnico di laboratorio (Categoria D2) per il supporto e lo sviluppo dei laboratori di chimica, relativo allo svolgimento di indagini diffrattometriche ed analisi spettroscopiche.

Educazione: 2 Novembre 2001- 31 Ottobre 2004 Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università del Piemonte Orientale "Amedeo Avogadro". Titolo Tesi di dottorato di ricerca: "Studio strutturale di sistemi ibridi organici/inorganici: le spicole silicee da spugne marine".

Durante tale dottorato ha trascorso un periodo di tre mesi (gennaio-aprile 2003) presso l'Institute of Biophysics and X-Ray Structure Research, Austrian Academy of Sciences (Graz, Austria) e la SAXS beamline BL 5.2L presso il Sincrotrone ELETTRA (Trieste, Italia), sotto la supervisione del Dr. Heinz Amenitsch, per apprendere i principi delle tecniche di scattering a basso angolo (SAXS).
2001 Esame di Stato di abilitazione all'esercizio della professione di chimico.

1995 – 2001 Laurea in Chimica, in data 18 Luglio 2001, presso l'Università del Piemonte Orientale A. Avogadro. Titolo di Tesi di Laurea: "Studio Chimico-Fisico teorico e sperimentale di materiali silicei di origine biologica." Votazione conseguita: 106/110.

01 Febbraio 2005 - 31 Gennaio 2006: Assegno per la collaborazione ed attività di ricerca, nell'area delle Scienze Chimiche-S.S.D. CHIM/02. Programma di ricerca "Studio strutturale di materiali silicei di interesse biomedico mediante tecniche diffrattometriche" presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie Avanzate - Università del Piemonte Orientale A. Avogadro.

02 Novembre 2004 - 31 Dicembre 2004: Contratto di prestazione d'opera coordinata e continuativa inerente alla caratterizzazione di superfici di materiali a basso ordine strutturale mediante metodi diffrattometrici e tecniche di calcolo presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie Avanzate - Università del Piemonte Orientale A. Avogadro.

Attività Scientifica

Gianluca Croce si occupa dello studio strutturale di vari composti e della caratterizzazione delle loro proprietà chimico-fisiche mediante tecniche sperimentali diffrattometriche e di calcolo teorico sia di tipo classico che quantomeccanico ab initio. Ha inoltre intrapreso lo studio di materiali a basso ordine strutturale mediante diffusione dei raggi X ai bassi angoli (SAXS). L'attività di ricerca si svolge nel campo dell'analisi strutturale di sistemi molecolari e solidi cristallini d'interesse della scienza dei materiali (biomateriali sia di origine naturale che sintetica, addotti molecolari, zeoliti, composti organometallici). La principale metodologia sperimentale d'indagine strutturale impiegata è la diffrattometria a raggi X da cristallo singolo e da polveri e la diffusione dei raggi X ai bassi angoli, utilizzando sia sorgenti convenzionali che luce di sincrotrone, a seconda del tipo di problematica affrontata. Si è occupato, in collaborazione con la Swiss Norwegian Beamline presso il Sincrotrone ESRF (Grenoble, Francia), dello sviluppo di metodologie innovative per analizzare la reattività dei materiali solidi mediante studi simultanei di diffrazione di Raggi X e spettroscopia Raman in condizioni non ambiente. A questi metodi sperimentali sono stati affiancati approcci teorici sia di tipo

classico (meccanica e dinamica molecolare) che quantomeccanico (a livello semiempirico ed ab initio) utilizzando tecniche di calcolo e di grafica molecolare per il modeling di sistemi chimici.

E' autore di 33 pubblicazioni su riviste internazionali e di diverse comunicazioni a congressi nazionali ed internazionali. Ha partecipato, in qualità di docente, all' "AIC International School" negli anni 2009 e 2011; in quest'ultima edizione è stato inoltre membro del comitato organizzativo. Il suo lavoro di ricerca è stato svolto nell'ambito di collaborazioni nazionali ed internazionali qui di seguito elencate: U. Benatti e M. Giovine (Università di Genova), H. Amenitsch (Institute of Biophysics and X-Ray Structure; Research, Austrian Academy of Sciences, Graz, Austria), G. Bavestrello (Università di Ancona), R. Gobetto e E. Diana (Università Torino), E. Garrone, B. Onida e E. Vernè (Politecnico di Torino), W. van Beek e H. Emerich (ESRF, Grenoble, Francia), R. Gonzales (Centro Nacional de Investigaciones Científicas, Cuba).

Patrizia ROSSI

La Dott.ssa Patrizia Rossi si è laureata in Chimica il 20 Ottobre 1997 presso l'Università degli Studi di Firenze, con la votazione di 110/110 e lode. Nel 2002 ha inoltre conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienza e Tecnologia dei Materiali presso la stessa Università.

Dal 2002 al 2010 la Dott.ssa Rossi è stata assegnista di ricerca, borsista e ricercatrice a tempo determinato presso la Facoltà di Ingegneria dell'Università di Firenze e presso il Centro Interdipartimentale di Cristallografia Strutturale (CRIST) della medesima Università.

Da novembre 2010 è Ricercatrice presso il Dipartimento di Energetica "S. Stecco" dell'Università degli Studi di Firenze.

In questi anni la Dott.ssa Rossi si è occupata, in qualità di codocente o di titolare del corso, dell'insegnamento dei corsi di Chimica e di Complementi di Chimica per i corsi di Laurea in Ingegneria dell'Ambiente e delle Risorse e in Ingegneria Matematica, ha fornito attività di supporto alla didattica per il Dottorato in Scienze Chimiche ed ha seguito la realizzazione di diverse tesi di Laurea in Chimica.

L'attività di ricerca della Dott.ssa Patrizia Rossi riguarda l'utilizzo di tecniche di diffrazione di raggi X e lo studio delle relazioni struttura-proprietà di piccole molecole e di composti di interesse farmacologico. La Dott.ssa Rossi svolge la propria attività di ricerca nell'ambito di una serie di collaborazioni sia con enti di ricerca pubblici (tra queste possiamo ricordare quelle con il gruppo del Prof. Micheloni dell'Università di Urbino e con il gruppo del Prof. Fragalà dell'Università di Catania) che privati (Menarini Ricerche S.p.A.).

La Dott.ssa Rossi è coautrice di 69 articoli su riviste internazionali con referee nonché di numerose comunicazioni a Congressi.

La Dott.ssa Rossi è socia dell'Associazione Italiana di Cristallografia e della European Crystallographic Association.

Contributo alle attività della AIC

La Dott.ssa Rossi è stata segretaria del Comitato Scientifico del XX Congress of the International Union of Crystallography che si è tenuto a Firenze nell'agosto del 2005. In qualità di segretaria si è occupata in special modo dell'organizzazione dei 98 microsposi e della sessione poster nonché della realizzazione del libro degli Abstracts.

Tale congresso ha visto la partecipazione di oltre 3000 ricercatori (tra i quali tre insigniti del Premio Nobel) provenienti da 62 paesi ed ha grandemente contribuito a dare risalto all'attività scientifica di tutti i cristallografi italiani.

Consiglieri:

Alessandra CRISPINI

Dati personali- Data di nascita: 25/11/1964, Luogo di nascita: Cosenza; E-Mail: a.crispini@unical.it
Alessandra Crispini ha conseguito la Maturità Classica presso il Liceo Classico B. Telesio di Cosenza nell'anno 1982/1983 con votazione 60/60. Iscrittasi nell'A.A. 1983/84 al Corso di Laurea in Chimica dell'Università della Calabria ha conseguito la Laurea nell'anno Accademico 1987/1988 con voti 110/110 e Lode.

Ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche in data 20/09/1993 .

Ha svolto attività postdottorale della durata complessiva di 10 mesi (dal 19/4/1993 al 19/2/1994) presso "School of Chemistry, University of Bristol, Cantock's Close, Bristol England BS8 1TS (GB)", sotto la direzione del Prof. A. Guy Orpen, avendo usufruito di una borsa di studio per l'estero conferitale dal Consiglio Nazionale delle Ricerche..

Da maggio 1994 al dicembre 2001 è stata ricercatrice presso la Facoltà di Farmacia dell'Università della Calabria per il settore scientifico disciplinare CHIM03. Dal Gennaio 2002 ricopre l'incarico di professore associato presso la Facoltà di Farmacia dell'Università della Calabria. La Prof. Alessandra Crispini è risultata idonea per la valutazione comparativa di n. 1 posto di Professore universitario di prima fascia per il SSD CHIM03 presso la Facoltà di Farmacia dell'Università della Calabria con decorrenza del 29/07/2010.

Attività organizzative e gestionali:

L'attività di ricerca legata all'utilizzo delle tecniche diffrattometriche si è sviluppata attraverso la costituzione di un nuovo laboratorio di diffrattometria a raggi X (LDIFFRAX) costituitosi su finanziamenti del Centro di Eccellenza dei Materiali Nanostrutturati, CEMIF.CAL, e situato presso il Dipartimento di Chimica dell'Università della Calabria.

Appartenenza a società e comitati scientifici:

La Prof. Crispini è membro attivo della Società Italiana di Cristallografia, Società Chimica Italiana, International Union of Crystallography (IUCr). Ha fatto parte di diversi comitati scientifici ed organizzativi relativi ai seguenti congressi: VI Co.G.I.C.O. 2004 (Cetraro 30 Settembre-3 Ottobre 2004), XXXV Congresso Nazionale dell'Associazione Italiana di Cristallografia (Ferrara, 18-21 Settembre 2006), Tenth International Symposium on Metallomesogens (Cetraro, 30 Maggio-2 Giugno 2007), First Meeting of the Italian and Spanish Crystallographic Associations (MISCA, Copanello, 24-28 Settembre 2007), XXI Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Osaka (Giappone) 23-31 Agosto 2008.

Principali interessi di ricerca:

L'attività scientifica della Prof. Alessandra Crispini è iniziata con l'approfondimento delle tecniche di risoluzione strutturale per Diffrattometria a raggi X su cristallo singolo applicate a composti inorganici e di coordinazione. Successivamente, alla caratterizzazione strutturale mediante raggi X su cristallo singolo si è aggiunta l'utilizzo della tecnica di Diffrazione a raggi X su polveri microcristalline in temperatura variabile per l'analisi delle proprietà alla stato solido e liquido cristallino di molecole organiche e metallororganiche allo di studiare il comportamento delle fasi in funzioni delle diverse variabili in grado di influenzare o determinare i diversi stati di aggregazione.

Le suddette tecniche sono quindi a tematiche specifiche quali l'organizzazione molecolare in solidi inorganici e metallorganici, riassumibili nelle sottotematiche quali: a) caratterizzazione diffrattometrica di materiali metallo-mesogeni e luminescenti; b) utilizzo di Databases strutturali per correlazioni strutture/proprietà; c) caratterizzazione strutturale e di polimorfismo di materiali di interesse farmacologico.

L'attività di ricerca svolta dalla Prof. Crispini ha prodotto un totale di 100 lavori a stampa su riviste internazionali e numerose partecipazioni a Congressi Nazionali ed Internazionali.

Diego GATTA

G. Diego Gatta è professore associato di Mineralogia Applicata presso l'Università degli Studi di Milano. La sua attività di ricerca è focalizzata sui seguenti temi:

- studio delle proprietà cristallografiche e cristallografiche di materiali microporosi (naturali e sintetici) in condizioni ambientali e non ambientali, al fine di definirne il comportamento termo-elastico, l'evoluzione strutturale in regime di alta pressione e temperatura, le implicazioni geofisiche;
- caratterizzazione di minerali tossici e nocivi utilizzati in campo industriale, con particolare riferimento agli amianti e ai nuovi materiali sostitutivi degli asbesti;
- sintesi e caratterizzazione di composti sintetici cristallini in grado di ospitare radioisotopi (*nuclear waste disposal materials*);
- sintesi e caratterizzazione di composti sintetici cristallini refrattari e ultraduri per applicazioni tecnologiche;
- caratterizzazione di materiali gemmologici, naturali e sintetici.

Le metodologie analitiche utilizzate per gli studi succitati spaziano tra la diffrazione di raggi-X e neutroni da cristallo-singolo e da polveri, la diffrazione di elettroni in microscopia elettronica a trasmissione, la microscopia elettronica a scansione, la spettrofotometria IR e Raman.

Diego Gatta ricopre diversi ruoli editoriali, ed in particolare:

- (dal 2005) Editore Associato della rivista "The American Mineralogist" (edito dalla Mineralogical Society of America),
- (dal 2006) Editore Associato della rivista "Mineralogical Magazine" (edito dalla Mineralogical Society of Great Britain and Ireland)
- (dal 2007) Editore Associato della rivista "The Open Journal of Mineralogy".

E' stato vincitore di premi nazionali ed internazionali, tra questi:

- (2002) Premio Nazionale della Società Italiana di Mineralogia e Petrologia per Tesi di Dottorato;
- (2004) Premio Nazionale della Associazione Italiana di Cristallografia per Giovani Ricercatori (oggi "Premio Nardelli")
- (2006) Premio "Ugo Panichi" della Società Italiana di Mineralogia e Petrologia per l'eccellenza dell'attività scientifica svolta da giovani ricercatori;
- (2008) "Max Hey Medal" della Mineralogical Society of Great Britain and Ireland.

Negli ultimi sei anni (due mandati) è stato coordinatore della Commissione Strumentazione e Calcolo della Associazione Italiana di Cristallografia.

Paola GILLI

Curriculum: Laurea in Chimica cum laude (1990) e Ph.D. in Chimica Fisica (1994) presso l'Università di Ferrara, PostDoc presso il CCDC (Cambridge, UK) diretto da Olga Kennard e il Laboratoire de Cristallografie ICSN-CNRS (Gif-sur-Yvette, France) diretto da Claudine Pascard. Dal 1997, ricercatore e titolare di corsi di Chimica Fisica presso l'Università di Ferrara. Visiting professor presso il LCM3B diretto da Claude Lecomte (University Henri Poincaré Nancy I, France).

Attività: Ha partecipato a due progetti europei ed a numerosi progetti di ricerca nazionali nel campo della cristallografia, chimica strutturale e chimica fisica delle interazioni molecolari.

Dal 2003, segretaria del MIRSIG (Molecular Interaction and Recognition Special Interest Group of the European Crystallographic Association, ECA-SIG7). Ha collaborato all'organizzazione di congressi e

workshops nazionali ed internazionali ed è stata chairman di sei microsims dedicati alle interazioni molecolari.

Ricerca: Ha al suo attivo 70 articoli scientifici, 6 capitoli di libri, oltre 100 comunicazioni e 20 conferenze su invito a congressi internazionali nei campi della chimica strutturale, meccanica quantistica applicata, biotermodinamica e chimica fisica delle interazioni molecolari, con particolare riguardo al legame ad idrogeno. Le sue pubblicazioni hanno ottenuto oltre 3300 citazioni. E' co-autore della 3^a edizione del trattato "Fundamentals of Crystallography", edito da C. Giacovazzo (Oxford University Press, 2011) e del libro "The Nature of the Hydrogen Bond. Outline of a Comprehensive Hydrogen Bond Theory", G. Gilli and P. Gilli, Oxford University Press, 2009.

Antonietta GUAGLIARDI

Nata a Trenta (CS) il 9 Giugno 1962.

1987: Laurea in Scienze Geologiche presso l'Università di Bari, voto 110 e lode.

1988: Contratto a tempo indeterminato presso ITALSIEL S.p.A. (azienda gruppo IRI), Roma, da cui mi sono licenziata nel 1990.

1990: borsa di formazione biennale CNR, presso IC-CNR (ex IRMEC) di Bari

1990-1995: partecipazione a tutte le scuole AIC organizzate presso la Colombella, Perugia e a molte altre, nazionali ed internazionali.

1995: Ricercatore (tempo determinato) presso IC-CNR, con posizione permanente dal 1998; abilitazione a senior scientist dal 2006.

2009-oggi: in comando presso l'Università dell'Insubria, Como.

ESPERIENZE ALL'ESTERO 1996: Visiting scientist all'Università di Lund (Svezia); 1998: Guest scientist presso l'Università di Stoccolma (Svezia); 2001: Guest scientist l'Università di Malaga (Spagna).

Attività di ricerca: Si divide in due settori fondamentali, relativi all'attività fino al 2002/2003 e dal 2003 ad oggi, rispettivamente:

1. Metodi per la soluzione *ab initio* di strutture cristalline da dati di diffrazione da cristallo singolo e, in particolare, da polveri. Questi ultimi comprendono: a) tecniche di *Indexing* di un pattern di diffrazione policristallino, b) tecniche di *Whole profile fitting* per l'estrazione delle intensità; c) Metodi Diretti per il phasing; d) Metodo Rietveld per affinamento strutturale. A questi si aggiunge l'esperienza per quantificazione di miscele polifasiche con metodo Rietveld ed in assenza di modello strutturale.

2. Modeling e caratterizzazione di materiali nano-cristallini in termini di distribuzione in size/shape di popolazioni mono- e bivariate, strain e struttura cristallina, mediante Tecniche Total Scattering nello spazio reciproco (*Debye Function Analysis*), con applicazioni a *metalli, ossidi e ceramici*.

In entrambe le linee di ricerca, ho collaborato allo sviluppo di pacchetti software disponibili per la comunità scientifica nazionale ed internazionale, di cui sono coautrice :

1. Sir92/Sir97 (soluzione ab initio da cristallo singolo, oltre 6000 licenze);
2. Extra, Expo (soluzione ab initio da materiali policristallini, oltre 1000 licenze);
3. Quanto (analisi quantitativa di miscele policristalline, ca. 1000 licenze);
4. Debussy Suite (Open Source Project per Debye Function Analysis, disponibile dall'inizio 2011).

Co-autrice di oltre 60 lavori su riviste ISI e numerose presentazioni a congresso; nr. Totale di Citazioni 10140; H-index: 17

ATTIVITÀ ORGANIZZATIVE IN AMBITO AIC

Socia AIC dai primi anni '90.

1. Membro del Comitato Organizzatore del XXX Congresso dell'Associazione Italiana di Cristallografia, Martina Franca (TA), 19-22 Settembre 2000
2. Membro della Commissione per il Coordinamento Didattico, triennio 2006-2008.
3. Coordinatrice della Commissione per il Coordinamento Didattico, triennio 2009-2011. Nel corso dei due trienni ho (co)organizzato, in qualità di chair o membro dei Comitati Scientifici (CS) e/o Organizzatori (CO), i seguenti eventi:
 - a. *Scuola di Diffrazione da Materiali Policristallini*, Martina Franca (TA) 26-30 Giugno 2006, sponsorizzata dall'AIC, (chair CS e CO). Oltre 90 partecipanti (tra studenti e docenti).
 - b. Workshop *Advanced Methods in X-Ray Charge Density Analysis*, Martina Franca (TA) 3-6 September 2007, sponsorizzato dall'AIC, (membro CO).
 - c. Scuola Internazionale AIC-PSI-SSCr/SGK *Structure Determination from Powder Diffraction Data*, Paul Scherrer Institute (PSI), 18-22 June 2008, Svizzera, (membro CS ed CO). Oltre 65 partecipanti, selezionati su ca. 120 domande.
 - d. Scuola internazionale AIC *Scattering Techniques: from microscopic to atomic structures* Camerino (MC), 30 Agosto - 4 Settembre 2009 (chair CS e CO). Oltre 50 partecipanti (tra studenti e docenti).
 - e. Scuola internazionale AIC-PSI-SSCr/SGK: *Diffraction at the Nanoscale: Nanocrystals, Defective & Amorphous Materials*, PSI, Villingen, 24-30 May 2010. (membro CS ed CO). Oltre 65 partecipanti, con chiusura anticipata delle registrazioni.
 - f. Scuola internazionale AIC: *Crystallography beyond Diffraction: the role of Spectroscopies and Theoretical Calculations in revealing Structural Information*, Camerino (MC), 4-8 Luglio 2011 (membro CO). Oltre 70 partecipanti (tra studenti e docenti).

ATTIVITÀ ORGANIZZATIVE IN AMBITO NON AIC

1. Membro della *European Powder Diffraction Conference* (EPDIC, nonché SIG-8 dell'ECA), dal 2009. Nell'ambito di tale attività ho partecipato alla organizzazione scientifica di EPDIC-12, Darmstadt, Germania, 27-30 August 2010 e partecipo alla organizzazione scientifica di EPDIC-13, Grenoble, Francia, 28-31 Ottobre 2012.
2. Membro del Comitato Organizzatore del V SIR workshop, Bari, 17-20 Dicembre 1996
3. Membro del Comitato Organizzatore del IV SIR workshop, Bari, 5-7 Aprile 1993

ESPERIENZE DI DOCENZA

1. Professore a contratto, AA 2008/09 e AA 2009/10, Corso di Laurea Specialistica in Scienze Ambientali, Facoltà di Scienze MM.FF.NN. (Como), Università dell'Insubria.
2. Lecturer in numerose scuole nazionali ed internazionali.

Piero MACCHI

Data nascita 01/12/1970

Mi sono laureato in chimica nel 1994, presso l'Università di Milano. Già durante lo svolgimento della tesi di laurea mi sono interessato alla cristallografia, analizzando strutture di cluster metallo carbonilici in cristalli molecolari e modellandole con metodi teorici semi-empirici. Ho svolto il dottorato di ricerca con il Prof. A. Sironi presso l'Università di Milano, dedicandomi allo studio di densità elettronica, ottenuta da diffrazione di raggi X su monocristalli, e di transizioni di fase in stato solido, in funzione della temperatura.

Dopo il dottorato, ho trascorso un periodo presso l'Università di Aarhus in Danimarca, sempre occupandomi di densità elettronica, di diffrazione su monocristallo a basse temperature e utilizzando anche radiazione di sincrotrone.

Sono poi tornato in Italia e dal 2002 al 2008 sono stato ricercatore di Chimica Inorganica, presso il dipartimento di Chimica strutturale dell'Università di Milano. Ho avuto modo di svolgere ulteriori

attività di ricerca in ambito cristallografico, per esempio studiando fasi solide di composti organici e metallo-organici ad alta pressione, studiando modalità di formazione di cristalli di polimeri di coordinazione e indagando le condizioni strutturali che producono generazione di seconda armonica in cristalli ibridi organici-inorganici.

Nel 2009 sono divenuto docente di cristallografia chimica presso l'università di Berna, dove dirigo un gruppo di ricerca. Ho continuato ad occuparmi di densità elettronica in materiali organo-metallici, di materiali molecolari sotto pressione e di nuove metodologie diffrattometriche.

Ho ricevuto alcuni riconoscimenti, tra cui il premio AIC 2002 (ora premio Nardelli).

Sono socio AIC da oltre dieci anni, ho attivamente partecipato alle attività didattiche dell'associazione in qualità di docente e organizzatore. Dal 2006 al 2008 mi sono occupato della commissione didattica organizzando due scuole. Dal 2009 sono tesoriere dell'associazione, un impegno molto oneroso ma che ho svolto per l'esclusivo bene dell'associazione. Ho deciso di candidarmi al Consiglio di Presidenza nel triennio 2012-2014, perché credo di poter mettere a disposizione sia la mia esperienza sia molte nuove proposte al fine di promuovere la cristallografia in Italia, e non soltanto al fine di promuovere l'associazione medesima.

Lucia MAINI

Lucia Maini è nata a Bologna. Si laurea in Chimica a Bologna nel marzo del 1997, dopo avere frequentato l'ultimo anno di studi presso l'Università di California, Santa Barbara, grazie al Exchange Abroad Program tra l'University of California e Università di Bologna. Durante il soggiorno all'estero ha preparato la tesi di laurea sotto la supervisione del Prof. Peter C. Ford. Nel novembre 1997 inizia il dottorato in Scienze Chimiche presso l'Università di Bologna, durante il periodo di dottorato trascorre nel 1997 dieci settimane presso il gruppo di Dr. Sylvia Draper al Trinity Collage of Dublin, Ireland e nel 1998 due mesi presso il gruppo del professore Wais Hosseini al Université Louis Pasteur, Strasbourg.

Nel marzo 2001 consegue il titolo di Dottore di ricerca con la tesi "Progettazione e sintesi di cristalli molecolari". Dal marzo 2001 fino a ottobre 2006 lavora presso l'Università di Bologna con assegni di ricerca oltre ad avere contratti per il supporto alla didattica per i corsi di chimica generale.

Dal novembre 2006 prende servizio come ricercatore presso Facoltà di Scienze MFN dell'Università di Bologna. Dal 1998 ad oggi collabora attivamente al comitato "Conoscere la Chimica" del dipartimento di chimica "G. Ciamician" per il divulgamento delle scienze chimiche. E' autrice o coautrice di circa 70 pubblicazioni in riviste scientifiche ad elevato impact factor ed ha partecipato a diversi congressi nazionali ed internazionali.

Ha valutato articoli per la pubblicazione nelle riviste Chemical Communication, CrysEngComm, New Journal of Chemistry.

E' una dei soci di Polycrystalline s.r.l. , *spin-off* accademico nato nel 2005 con cui collabora.

Stefano MANGANI

Birth : Bagno a Ripoli – Italy June 26, 1951

Education : Degree in Chemistry magna cum laude, from University of Florence, March 1977.

Academic positions: Postdoctoral fellow in the Department of Biophysics and Biochemistry at Texas A&M University; 1979-1981. Assistant Professor, Chemistry Department, University of Siena 1983-94
Present position; Full professor of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Science, University of Siena.

Society memberships: Italian Chemical Society, Italian Crystallographic Association, European Crystallographic Association, American Crystallographic Association, Society of Biological Inorganic Chemistry

Scientific Publications: Author/co-author of 135 publications on international scientific journals and book chapters on scientific book series. Depositor of 82 protein structures in the Protein Data Bank. Depositor of 1 international patent on a new inhibitor of human thymidylate synthase.

Total Citations: 2432, H-index: 29

Educational Publications:

General and Inorganic Chemistry university textbook. A WEB course on General Chemistry.

Professional Activities and Services to the Community (selected)

Member of the international advisory board of the head of the European Molecular Biology Laboratory (EMBL).

Member of the scientific advisory committee for XAS spectroscopy of the EMBL Hamburg outstation.

Member of the scientific advisory committee for X-ray crystallography of ESRF

Member of the scientific advisory committee for XAS spectroscopy of the Stanford Synchrotron Radiation Laboratory

Member of the steering group for X-ray Absorption for Biology in Europe

External reviewer, CIVR, Italian Research Evaluation Committee.

Reviewing activity for: *Journal of the American Chemical Society, Accounts of Chemical Research, Biochemistry, Inorganic Chemistry, PROTEINS: Structure, Function, and Bioinformatics, FEBS Letters, FEMS, Biopolymers, Inorganica Chimica Acta, European Journal of Inorganic Chemistry, Journal of Inorganic Biochemistry, Journal of Biological Inorganic Chemistry, Journal of Molecular Biology, Acta Crystallographica D and F, Journal of Synchrotron Radiation, Structure.*

Summary of scientific activities

Main field of research: bioinorganic chemistry and structural biology. The present scientific interest is focused on the study of enzyme and metallo-enzyme catalysis, of the metal ion transport by metallo-chaperones and of the protein-protein interactions, with particular emphasis on the chemistry occurring at the metal sites as revealed by accurate structural data. Such data are obtained by X-ray crystallography and by X-ray absorption spectroscopy (XAS, XANES, EXAFS). The preferred approach for the study of enzyme mechanisms consists in the structural study of enzyme-substrate (substrate-analog), enzyme-transition state analog complexes and intermediates in order to obtain snapshots along the reaction coordinate of the system. The correlation between the structural data and other mechanistic information coming from kinetic/thermodynamic studies, UV-vis spectroscopy, NMR spectroscopy etc., allows the proposal of accurate models for enzyme-catalyzed reactions. A similar approach can be used to study the function of metallo-proteins where the chemistry occurring at the metal site can be understood in structural terms by monitoring the metal center and its surroundings by XAS. Concerning methodology, he has introduced and exploited the combined use of XAS and NMR spectroscopies in order to complete and accelerate the process of structure determination of metallo-proteins in solution and, at the same time, to gain information on the electronic structure of the metal ion and on how it varies in different chemical environments.

X-ray crystallography is also applied to the study of the mechanism and of the inhibition of enzymes relevant in human pathology like β -lactamases of all classes and human and bacterial enzymes of the folate pathway. These studies aim to the discovery and optimization of new inhibitor molecules valuable as lead for drug development.

Pierangelo METRANGOLO

Pierangelo Metrangolo (Lecce, 16 April 1972) is full professor at the Politecnico di Milano since the 1 of January 2011. He has been EU Fellow at the University of Toulouse (France, 2001), visiting Professor at the University of York (UK, 2005), and at the University of Jyväskylä (FI, 2006). Since 2010 he also holds a position of visiting professor of molecular recognition at the VTT-Technical Research Centre of Finland.

His awards include the 2005 “G. Ciamician” medal of the Division of Organic Chemistry of the Italian Chemical Society, the 2005 Journals Grant Award of the Royal Society of Chemistry, the Young Chemist Award and the CrystEngComm Sponsored Lectureship at the 42nd IUPAC World Chemistry Congress. He is Topic Editor of the American Chemical Society Journal, *Crystal Growth & Design*. His research interests include crystal engineering, supramolecular, and biomimetic materials. He is author of more than 123 peer-reviewed publications with more than 3568 citations (h-index: 33).

Massimo MORET

Nato a Milano l'8 marzo 1961, si è laureato in Chimica presso l'Università di Milano nel gennaio 1987 con votazione di 110/110 e lode. Da febbraio 1987 a ottobre 1987 ha frequentato l'Istituto di Chimica Strutturistica Inorganica conducendo ricerche sui complessi mono- e polinucleari dei metalli di transizione. Da novembre 1987 a luglio 1989 ha frequentato l'Istituto di Ricerche Farmacologiche "Mario Negri" di Milano, ottimizzando la sintesi di N-nitrosoammine marcate con ¹⁵N e l'analisi dei loro metaboliti mediante tecniche GC-MS. Ha frequentato il IV ciclo del dottorato in Scienze Chimiche, presso l'Istituto di Chimica Strutturistica Inorganica dell'Università di Milano, conseguendo nel luglio 1992 il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche con una tesi su: "Studi strutturali di cluster carbonilici a metalli misti". Dal 1° novembre 1991 al 31 ottobre 1999 ha ricoperto il ruolo di ricercatore presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN. dell'Università di Milano presso il Dipartimento di Chimica Strutturale e Stereochimica Inorganica. Dal 1° novembre 1999 è professore associato presso la facoltà di Scienze MM.FF.NN. dell'Università di Milano-Bicocca, afferendo al Dipartimento di Scienza dei Materiali. La ventennale attività didattica ha riguardato numerosi corsi di chimica generale ed inorganica, corsi di laboratorio di chimica generale e di strutturistica chimica per i corsi di laurea in Chimica, Scienze Biologiche, Scienze Geologiche, Fisica, Ottica e Optometria, Ha fatto parte della Commissione Orientamento della Facoltà di Scienze dal 2002 al 2008. E' diventato membro del Collegio dei Docenti del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche a partire dal XIX ciclo. Gli interessi scientifici comprendono la caratterizzazione strutturale di composti di coordinazione e di semiconduttori organici, la caratterizzazione mediante microscopia ottica e a forza atomica di film sottili di semiconduttori organici cresciuti con tecniche OMBE, la simulazione di eteropitassie organico-organico, la crescita di cristalli organici ed inorganici, lo studio in situ della crescita cristallina mediante microscopia ottica e a forza atomica. E' coautore di oltre 150 pubblicazioni su riviste internazionali, di due brevetti e di oltre 130 tra comunicazioni poster ed orali a convegni scientifici nazionali ed internazionali. Viene regolarmente consultato come referee da riviste internazionali quali *Journal of Crystal Growth*, *Zeitschrift für Kristallographie*, *Journal of Applied Crystallography*, *CrystEngComm*, *Chemical Communications*, *PhysChemChemPhys*. Fa parte dell'Associazione Italiana di Cristallografia da oltre 20 anni e dal 1998 afferisce alla sezione di crescita dei cristalli. Negli ultimi due mandati del Consiglio di Presidenza è stato eletto membro della Commissione per la Crescita di Cristalli. E' stato co-direttore e docente delle scuole AIC “Meccanismi della crescita cristallina” (2003) e “Adsorption, Absorption and Crystal Growth” (2010), curando la pubblicazione del volume degli atti della scuola tenutasi nel 2003. Negli ultimi anni ha tenuto lezioni e dimostrazioni di laboratorio per le scuole superiori riguardanti la cristallografia e la crescita dei cristalli all'interno del Progetto Lauree Scientifiche.

Consiglia TEDESCO

La dr.ssa Consiglia Tedesco è ricercatrice presso il Dip.to di Chimica dell'Università di Salerno dal 1 Febbraio 2001 (settore CHIM02, Chimica Fisica). E' autrice di 42 articoli su riviste internazionali, 3 capitoli di libro, coautrice insieme al Prof. A. Immirzi del libro "La diffrazione dei cristalli".

Attualmente l'attività di ricerca si articola sulla progettazione, sintesi e caratterizzazione di nuovi complessi supramolecolari, utilizzando macrocicli organici variamente funzionalizzati come unità costitutive in collaborazione con il Prof. P. Neri e la Prof. I. Izzo.

Ha svolto diversi soggiorni di ricerca presso istituti esteri e ha stabilito diverse collaborazioni internazionali, in particolare con il Dr. R. Dinnebier (Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart, Germany), il Prof. J. L. Atwood (University of Missouri-Columbia, USA), la Dr.ssa Michela Brunelli (ESRF, Grenoble, France).

Dall' 1 Novembre 2004 al 30 Giugno 2005 è stata ospite presso il gruppo di Cristallografia Macromolecolare dell'European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France, diretto dal Dr. S. McSweeney.

E' responsabile di un programma di scambio tra Italia e Sud Africa nel triennio 2011-2013, per lo studio di materiali nanoporosi organici in collaborazione con il Prof. L. J. Barbour (Stellenbosch University). Dal 1996 è membro dell'Associazione Italiana di Cristallografia. Nel 2005 è stata eletta membro della Commissione Strumentazione e Calcolo dell'Associazione Italiana di Cristallografia, nella stessa carica è stata rieletta per il triennio 2008-2011.

Giuseppe ZANOTTI

Giuseppe Zanotti graduated in chemistry in Padua in 1974. He has been Post-doc (1976-1978), visiting fellow (Oxford, 1979-1980), Research Assistant (1978-1983), Associate Professor (1983-2000). He is now Full Professor of General and Inorganic Chemistry at the Faculty of Sciences, Padua University.

Since the beginning of its scientific career he has worked at the determination of molecules and macromolecules through x-ray diffraction. After a Dr degree dissertation on bovine pancreatic Ribonuclease, he has solved the structure of small molecules till the end of the '70. In 1979-80 he has spent one year at the Laboratory of Molecular Biophysics in Oxford, where he has taken part in the structural determination of the structure of Glycogen Phosphorylase *b*. Back to Padua, he has been interested in proteins that bind and transport small hydrophobic molecules. In particular, he has determined the crystal structure of proteins that bind retinoids (several plasma and cellular Retinol Binding Proteins) and of Fatty Acid Binding Protein from human muscle. More recently he has been involved in structural determination of protein kinases, in particular of Ser/Thr kinase CK2. He has solved the structure of several complexes of catalytic subunit of CK2 with inhibitors. A more recent field of interest is that of proteins from pathogenic bacteria: after determining the structure of some "dps-like" proteins from *H. pylori*, *B. anthracis* and *B. burgdorferi*, he is now involved in a project aimed at the determination of the structures of proteins important for the survival or pathogenicity of bacterium *H. pylori*; in particular, he has solved the structure of some of the proteins coded by genes of the pathogenicity island *cag* and of proteins involved in bacterium colonization or survival.

Giuseppe Zanotti has also been interested in theoretical aspects of the phase problem in crystallography. He has published papers on phase extension using direct methods and Hilbert transforms. More recently he has been interested in the analysis and in the conformational aspects of the structure of globular proteins. He has proposed the theory that tensegrity could be a unifying motif of folding of globular proteins.

He is author of 168 publications on international journals, 14 book chapters and he has deposited 101 protein structures at the Protein Data Bank (<http://www.rcsb.org>).

Honors

1. 2007, Mario Mammi Prize from the Italian Crystallographic Society (AIC).
2. 2008-present, Chairman of the Doctorate School in Biochemistry and Biotechnology
3. 2002-2005, Coordinator of the PhD program in Biotechnology of the Univ of Padova
4. 2005-2008, Coordinator of the PhD Program in Biotechnology within the PhD School of Biochemistry and Biotechnology of the University of Padua
5. 2002-present, Chairman of the Review Committee of Protein Crystallography of Elettra Synchrotron (Trieste)
6. International reviewer of research proposals in the research evaluation process financed by the Ministry of Science, Education and Sports of the Republic of Croatia
7. 2003-2005, Vice-Director of CRIBI (Centro di Ricerche Interdipartimentale sulle Biotecnologie Innovative)
8. 2000-present, member of VIMM (Venetian Institute of Molecular Medicine)
9. 2001-present, Member of the Center of Excellence on Signal Transduction: from molecular and cellular biology to clinical applications of the University of Padova
10. Invited speaker in several international symposia