

**FORMATO EUROPEO
PER IL CURRICULUM
VITAE**



INFORMAZIONI PERSONALI

Nome
Indirizzo
Telefono
Fax
E-mail
Nazionalità
Data di nascita

ANDREA BERNINI

**ABILITAZIONE SCIENTIFICA
NAZIONALE**

ASN Professore II fascia

Abilitazione Scientifica Nazionale a Professore Associato settore 05/E1
"Biochimica Generale e Biochimica Clinica" (SSD BIO/10) valida fino al
31/03/2023.

ASN Professore II fascia

Abilitazione Scientifica Nazionale a Professore Associato settore 03/B1
"Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici" (SSD CHIM/03)
valida fino al 23/12/2019.

ESPERIENZA LAVORATIVA

- Date (da – a)
- Nome e indirizzo del datore di lavoro
- Tipo di azienda o settore
- Tipo di impiego
- Principali mansioni e responsabilità

03/12/2018 – oggi
Università degli Studi di Siena, via Banchi di Sotto 55, Siena
Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia

Tecnologo a tempo determinato, inquadramento EP1
Project Manager del progetto Dipartimento di Eccellenza 2018-2022 del Dip. Biotecnologie,
Chimica e Farmacia

- Date (da – a)
- Nome e indirizzo del datore di lavoro
- Tipo di azienda o settore
- Tipo di impiego
- Principali mansioni e responsabilità

31/12/2002 – oggi – in aspettativa
Università degli Studi di Siena, via Banchi di Sotto 55, Siena
Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia

Tecnico amministrativo a tempo indeterminato, inquadramento D2 Area Tecnica, Tecnico-
Scientifica ed Elaborazione dati
Responsabile Struttura Org. primo livello: Laboratorio di Biologia Strutturale

INCARICHI DIDATTICI

- Date (da – a)
- Nome e indirizzo del datore di lavoro
- Tipo di azienda o settore

01/10/2012 – 30/09/2013
Università degli Studi di Siena, via Banchi di Sotto 55, Siena
Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia

- Tipo di impiego Incarico di docenza per il corso di Biochimica Applicata per il CdL Farmacia, 60 ore
- Date (da – a) 2004-2009
- Nome e indirizzo del datore di lavoro Università degli Studi di Siena, via Banchi di Sotto 55
- Tipo di azienda o settore
- Tipo di impiego Incarico annuale di docenza del corso "Protein Structure" nel Master in Bioinformatica 'Alberto del Lungo'
- Principali mansioni e responsabilità

ISTRUZIONE

- Date (da – a) 1997 - 2001
- Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione Università degli Studi di Siena
- Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio Biotecnologie, biofisica, bioinformatica.
- Qualifica conseguita Dottorato di Ricerca in Biotecnologie, XIII Ciclo
- Date (da – a) 1991 - 1997
- Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione Università degli Studi di Siena
- Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio Chimica
- Qualifica conseguita Laurea in Chimica, con votazione 110/110 cum laude
- Date (da – a) 1986 - 1991
- Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione ITIS T. Sarrocchi, Siena
- Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio Chimica
- Qualifica conseguita Diploma di Perito Chimico Capotecnico, con votazione 60/60

FORMAZIONE

- Date (da – a) 2011 – 2019
- Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione "Erasmus Staff Training", borsa annuale per training di una settimana presso Centre for Structural Biology, Imperial College London, UK
- Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio Biologia strutturale, bioinformatica.
- Qualifica conseguita

CAPACITÀ E COMPETENZE PERSONALI.

MADRELINGUA

ITALIANO

ALTRA LINGUA

INGLESE

OXFORD ENGLISH PLACEMENT TEST LIVELLO C2

CAPACITÀ E COMPETENZE RELAZIONALI

Gestione della comunicazione verbale e non verbale, incentivazione e valutazione del team di lavoro. Capacità di condurre le relazioni istituzionali.

CAPACITÀ E COMPETENZE ORGANIZZATIVE	Project management , coordinamento del team di lavoro.
CAPACITÀ E COMPETENZE TECNICHE	Conoscenza di personal computer, reti, de software Office suite, Adobe suite, Mathematica, MathCAD, Autocad, Avid.
CAPACITÀ E COMPETENZE ARTISTICHE	Computer graphics, multimedia.
ALTRE CAPACITÀ E COMPETENZE	Progettazione per attività a valere sul POR FSE e programmi quadro CE.
PATENTE O PATENTI	A, B
ULTERIORI INFORMAZIONI	
ALLEGATI	Publicazioni

Autorizzo il trattamento dei dati personali contenuti nel mio curriculum vitae in base all'art. 13 del D. Lgs. 196/2003 e all'art. 13 del Regolamento UE 2016/679 relativo alla protezione delle persone fisiche con riguardo al trattamento dei dati personali.

Siena, 01/10/2019

Publicazioni

- (1) Ascher, D. B., Spiga, O., Sekelska, M., Pires, D. E. V., Bernini, A., Tiezzi, M., Kralovicova, J., Borovska, I., Soltysova, A., Olsson, B., Galderisi, S., Cicaloni, V., Ranganath, L., Santucci, A., and Zatkova, A. (2019) Homogentisate 1,2-dioxygenase (HGD) gene variants, their analysis and genotype-phenotype correlations in the largest cohort of patients with AKU. *Eur. J. Hum. Genet.* 1.
- (2) Cicaloni, V., Spiga, O., Dimitri, G. M., Maiocchi, R., Millucci, L., Giustarini, D., Bernardini, G., Bernini, A., Marzocchi, B., Braconi, D., and Santucci, A. (2019) Interactive alkaptonuria database: investigating clinical data to improve patient care in a rare disease. *FASEB J.*
- (3) Bernini, A., Brodo, L., Degano, P., Falaschi, M., and Hermith, D. (2018) Process calculi for biological processes. *Nat. Comput.* 17, 345–373.
- (4) Brunetti, J., Riolo, G., Gentile, M., Bernini, A., Paccagnini, E., Falciani, C., Lozzi, L., Scali, S., Depau, L., Pini, A., Lupetti, P., and Bracci, L. (2018) Near-infrared quantum dots labelled with a tumor selective tetrabrached peptide for in vivo imaging. *J. Nanobiotechnology* 16, 21.
- (5) Pillozzi, S., Bernini, A., Spiga, O., Lelli, B., Petroni, G., Bracci, L., Niccolai, N., and Arcangeli, A. (2018) Peptides and small molecules blocking the CXCR4/CXCL12 axis overcome bone marrow-induced chemoresistance in acute leukemias. *Oncol. Rep.* 41, 312–324.
- (6) Bernini, A., Galderisi, S., Spiga, O., Bernardini, G., Niccolai, N., Manetti, F., and Santucci, A. (2017) Toward a generalized computational workflow for exploiting transient pockets as new targets for small molecule stabilizers: Application to the homogentisate 1,2-dioxygenase mutants at the base of rare disease Alkaptonuria. *Comput. Biol. Chem.* 70, 133–141.
- (7) Bodei, C., Brodo, L., Gori, R., Levi, F., Bernini, A., and Hermith, D. (2017) A static analysis for Brane Calculi providing global occurrence counting information. *Theor. Comput. Sci.* 696, 11–51.
- (8) Braconi, D., Millucci, L., Bernini, A., Spiga, O., Lupetti, P., Marzocchi, B., Niccolai, N., Bernardini, G., and Santucci, A. (2017) Homogentisic acid induces aggregation and fibrillation of amyloidogenic proteins. *Biochim. Biophys. Acta - Gen. Subj.* 1861.
- (9) Niccolai, N., Morandi, E., Gardini, S., Costabile, V., Spadaccini, R., Crescenzi, O., Picone, D., Spiga, O., and Bernini, A. (2017) Hot spot mapping of protein surfaces with TEMPOL: Bovine pancreatic RNase A as a model system. *Biochim. Biophys. Acta - Proteins Proteomics* 1865.
- (10) Spiga, O., Cicaloni, V., Bernini, A., Zatkova, A., and Santucci, A. (2017) ApreKure: An approach of Precision Medicine in a Rare Disease. *BMC Med. Inform. Decis. Mak.* 17.
- (11) Trezza, A., Bernini, A., Langella, A., Ascher, D. B., Pires, D. E. V., Sodi, A., Passerini, I., Pelo, E., Rizzo, S., Niccolai, N., and Spiga, O. (2017) A Computational Approach From Gene to Structure Analysis of the Human ABCA4 Transporter Involved in Genetic Retinal Diseases. *Investig. Ophthalmology Vis. Sci.* 58, 5320.
- (12) van der Weide, H., Brunetti, J., Pini, A., Bracci, L., Ambrosini, C., Lupetti, P., Paccagnini, E., Gentile, M., Bernini, A., Niccolai, N., Jongh, D. V.-D., Bakker-Woudenberg, I. A. J. M., Goessens, W. H. F., Hays, J. P., and Falciani, C. (2017) Investigations into the killing activity of an antimicrobial peptide active against extensively antibiotic-resistant *K. pneumoniae* and *P. aeruginosa*. *Biochim. Biophys. Acta - Biomembr.* 1859.
- (13) Bernini, A., Henrici De Angelis, L., Morandi, E., Spiga, O., Santucci, A., Assfalg, M., Molinari, H., Pillozzi, S., Arcangeli, A., and Niccolai, N. (2014) Searching for protein binding sites from Molecular Dynamics simulations and paramagnetic fragment-based NMR studies. *Biochim. Biophys. Acta - Proteins Proteomics* 1844, 561–566.
- (14) Alocci, D., Bernini, A., and Niccolai, N. (2013) Atom depth analysis delineates mechanisms of protein intermolecular interactions. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 436, 725–729.
- (15) Bottini, S., Bernini, A., De Chiara, M., Garlaschelli, D., Spiga, O., Dioguardi, M., Vannuccini, E., Tramontano, A., and Niccolai, N. (2013) ProCoCoA: A quantitative approach for analyzing protein core composition. *Comput. Biol. Chem.* 43, 29–34.
- (16) Falciani, C., Brunetti, J., Lelli, B., Ravenni, N., Lozzi, L., Depau, L., Scali, S., Bernini, A., Pini, A., and Bracci, L. (2013) Cancer selectivity of tetrabrached neurotensin peptides is generated by simultaneous binding to sulfated glycosaminoglycans and protein receptors. *J. Med. Chem.* 56.
- (17) Gulotto, D., Nolassi, M. S., Bernini, A., Spiga, O., and Niccolai, N. (2013) Probing the protein space for extending the detection of weak homology folds. *J. Theor. Biol.* 320, 152–158.
- (18) Bernini, A., Spiga, O., Venditti, V., Prischi, F., Botta, M., Croce, G., Tong, A. P. L., Wong, W. T., and Niccolai, N. (2012) The use of a ditopic Gd(III) paramagnetic probe for investigating alpha-bungarotoxin surface accessibility. *J. Inorg. Biochem.* 112, 25–31.
- (19) Pini, A., Lozzi, L., Bernini, A., Brunetti, J., Falciani, C., Scali, S., Bindi, S., Di Maggio, T., Rossolini, G. M., Niccolai, N., and Bracci, L. (2012) Efficacy and toxicity of the antimicrobial peptide M33 produced with different counter-ions. *Amino Acids* 43, 467–473.
- (20) Scali, M., Vignani, R., Bigliazzi, J., Paolucci, E., Bernini, A., Spiga, O., Niccolai, N., and Cresti, M. (2012) Genetic differentiation between Cinta Senese and commercial pig breeds using microsatellite. *Electron. J. Biotechnol.* 15, 1–11.
- (21) Spadaccini, R., Ercole, C., Gentile, M. A., Sanfelice, D., Boelens, R., Wechselberger, R., Batta, G., Bernini, A., Niccolai, N., and Picone, D. (2012) NMR studies on structure and dynamics of the monomeric derivative of BS-RNase: New insights for 3D domain swapping. *PLoS One* 7.
- (22) Bernini, A., and Temussi, P. (2011) Nuclear Magnetic Resonance of Amino Acids, Peptides, and Proteins. *Amin. Acids, Pept. Proteins Org. Chem.*
- (23) Bernini, A., Spiga, O., Consonni, R., Arosio, I., Fusi, P., Cirri, S., Guagliardi, A., and Niccolai, N. (2011) Hydration studies on the archaeal protein Sso7d using NMR measurements and MD simulations. *BMC Struct. Biol.* 11, 44.
- (24) Spiga, O., Summa, D., Cirri, S., Bernini, A., Venditti, V., De Chiara, M., Priora, R., Frosali, S., Margaritis, A., Di Giuseppe, D., Di Simplicio, P., and Niccolai, N. (2011) A structurally driven analysis of thiol reactivity in mammalian albumins. *Biopolymers* 95, 278–285.
- (25) Wang, Z., Huang, J.-D., Wong, K.-L., Wang, P.-G., Zhang, H.-J., Tanner, J. a, Spiga, O., Bernini, A., Zheng, B.-J., and Niccolai, N. (2011) On the mechanisms of bananin activity against severe acute respiratory syndrome coronavirus. *FEBS J.* 278, 383–389.
- (26) Casolare, M., Stalteri, L., Anselmi, C., Mandioli, D., and Bernini, A. (2010) E

- (25) Wang, Z., Huang, J.-D., Wong, K.-L., Wang, P.-G., Zhang, H.-J., Tanner, J. A., Spiga, O., Bernini, A., Zheng, B.-J., and Niccolai, N. (2011) On the mechanisms of bananin activity against severe acute respiratory syndrome coronavirus. *FEBS J.* **278**, 383–389.
- (26) Casolaro, M., Staltari, L., Anselmi, C., Mendichi, R., and Bernini, A. (2010) The protonation thermodynamics of cyclodextrin-containing polymers for drug inclusion. *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.* **67**.
- (27) Bernini, A., Venditti, V., Spiga, O., and Niccolai, N. (2009) Probing protein surface accessibility with solvent and paramagnetic molecules. *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.*
- (28) Bernini, A., Venditti, V., Spiga, O., Ciutti, A., Prischi, F., Consonni, R., Zetta, L., Arosio, I., Fusi, P., Guagliardi, A., and Niccolai, N. (2008) NMR studies on the surface accessibility of the archaeal protein Sso7d by using TEMPOL and Gd(III)(DTPA-BMA) as paramagnetic probes. *Biophys. Chem.* **137**, 71–75.
- (29) Pini, A., Falciani, C., Bindi, S., Lozzi, S., Brunetti, J., Bernini, A., Neri, R., Gian, M., and Bracci, L. (2008) Biochemical characterization and strong in vivo activity of a novel antimicrobial peptide specific for gram-negative bacteria. *J. Pept. Sci.*
- (30) Falciani, C., Lozzi, L., Pini, A., Corti, F., Fabbrini, M., Bernini, A., Lelli, B., Niccolai, N., and Bracci, L. (2007) Molecular basis of branched peptides resistance to enzyme proteolysis. *Chem. Biol. Drug Des.* **69**, 216–221.
- (31) Summa, D., Spiga, O., Bernini, A., Venditti, V., Priora, R., Frosali, S., Margaritis, A., Di Giuseppe, D., Niccolai, N., and Di Simplicio, P. (2007) Protein-thiol substitution or protein dethiolation by thiol/disulfide exchange reactions: The albumin model. *Proteins Struct. Funct. Genet.* **69**.
- (32) Venditti, V., Bernini, A., De Simone, A., Spiga, O., Prischi, F., and Niccolai, N. (2007) MD and NMR studies of alpha-bungarotoxin surface accessibility. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **356**, 114–117.
- (33) Bernini, A., Spiga, O., Ciutti, A., Scarselli, M., Bottoni, G., Mascagni, P., and Niccolai, N. (2006) Corrigendum to “NMR studies of the inclusion complex between β -cyclodextrin and paroxetine” [*Eur. J. Pharm. Sci.* **22** (2004) 445–450] (DOI:10.1016/j.ejps.2004.04.007). *Eur. J. Pharm. Sci.* **28**.
- (34) Bernini, A., Spiga, O., Venditti, V., Prischi, F., Bracci, L., Huang, J., Tanner, J. A., and Niccolai, N. (2006) Tertiary structure prediction of SARS coronavirus helicase. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **343**.
- (35) Bernini, A., Spiga, O., Ciutti, A., Venditti, V., Prischi, F., Governatori, M., Bracci, L., Lelli, B., Pileri, S., Botta, M., Barge, A., Laschi, F., and Niccolai, N. (2006) NMR studies of BPTI aggregation by using paramagnetic relaxation reagents. *Biochim. Biophys. Acta - Proteins Proteomics* **1764**, 856–862.
- (36) Bernini, A., Spiga, O., Venditti, V., Prischi, F., Bracci, L., Tong, A. P. L., Wong, W. T., and Niccolai, N. (2006) NMR studies of lysozyme surface accessibility by using different paramagnetic relaxation probes. *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 9290–9291.
- (37) Lozzi, L., Pini, A., Falciani, C., Lelli, B., Brunetti, J., Pileri, S., Fabbrini, M., Bernini, A., Tonello, F., Dal Molin, F., Niccolai, N., and Bracci, L. (2006) Dendrimeric peptide inhibitors of anthrax lethal and edema factors. *J. Pept. Sci.*
- (38) Pini, A., Runci, Y., Falciani, C., Lelli, B., Brunetti, J., Pileri, S., Fabbrini, M., Lozzi, L., Ricci, C., Bernini, A., Tonello, F., Dal Molin, F., Neri, P., Niccolai, N., and Bracci, L. (2006) Stable peptide inhibitors prevent binding of lethal and oedema factors to protective antigen and neutralize anthrax toxin in vivo. *Biochem. J.* **395**, 157–163.
- (39) Spiga, O., Padula, M. G., Scarselli, M., Ciutti, A., Bernini, A., Venditti, V., Prischi, F., Falciani, C., Lozzi, L., Bracci, L., Valensin, P. E., Caudai, C., and Niccolai, N. (2006) Structurally driven selection of human hepatitis C virus mimotopes. *Antivir. Ther.* **11**.
- (40) Bracci, L., Pini, A., Runci, Y., Falciani, C., Ricci, C., Bernini, A., Niccolai, N., Fabbrini, M., Lelli, B., Lozzi, L., and Neri, P. (2005) Synthetic inhibitors of anthrax lethal toxin. *Faseb J.*
- (41) Song, H.-D., Tu, C.-C., Zhang, G.-W., Wang, S.-Y., Zheng, K., Lei, L.-C., Chen, Q.-X., Gao, Y.-W., Zhou, H.-Q., Xiang, H., Zheng, H.-J., Chern, S.-W. W., Cheng, F., Pan, C.-M., Xuan, H., Chen, S.-J., Luo, H.-M., Zhou, D.-H., Liu, Y.-F., He, J.-F., Qin, P.-Z., Li, L.-H., Ren, Y.-Q., Liang, W.-J., Yu, Y.-D., Anderson, L., Wang, M., Xu, R.-H., Wu, X.-W., Zheng, H.-Y., Chen, J.-D., Liang, G., Gao, Y., Liao, M., Fang, L., Jiang, L.-Y., Li, H., Chen, F., Di, B., He, L.-J., Lin, J.-Y., Tong, S., Kong, X., Du, L., Hao, P., Tang, H., Bernini, A., Yu, X.-J., Spiga, O., Guo, Z.-M., Pan, H.-Y., He, W.-Z., Manuguerra, J.-C., Fontanet, A., Danchin, A., Niccolai, N., Li, Y.-X., Wu, C.-I., and Zhao, G.-P. (2005) Cross-host evolution of severe acute respiratory syndrome coronavirus in palm civet and human. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **102**, 2430–2435.
- (42) Varrazzo, D., Bernini, A., Spiga, O., Ciutti, A., Chiellini, S., Venditti, V., Bracci, L., and Niccolai, N. (2005) Three-dimensional computation of atom depth in complex molecular structures. *Bioinformatics* **21**, 2856–2860.
- (43) Zheng, B. J., Guan, Y., He, M. L., Sun, H., Du, L., Zheng, Y., Wong, K. L., Chen, H., Chen, Y., Lu, L., Tanner, J. A., Watt, R. M., Niccolai, N., Bernini, A., Spiga, O., Woo, P. C. Y., Kung, H. F., Yuen, K. Y., and Huang, J. D. (2005) Synthetic peptides outside the spike protein heptad repeat regions as potent inhibitors of SARS-associated coronavirus. *Antivir. Ther.* **10**, 393–403.
- (44) Altroff, H., Schlinkert, R., Van Der Walle, C. F., Bernini, A., Campbell, I. D., Werner, J. M., and Mardon, H. J. (2004) Interdomain tilt angle determines integrin-dependent function of the ninth and tenth FIII domains of human fibronectin. *J. Biol. Chem.* **279**.
- (45) Anselmi, C., Centini, M., Granata, P., Sega, A., Buonocore, A., Bernini, A., and Facino, R. M. (2004) Antioxidant activity of ferulic acid alkyl esters in a heterophasic system: A mechanistic insight. *J. Agric. Food Chem.* **52**.
- (46) Bernini, A., Spiga, O., Ciutti, A., Chiellini, S., Menciassi, N., Venditti, V., and Niccolai, N. (2004) On the dynamics of water molecules at the protein solute interfaces. *Homeopathy* **93**.
- (47) Bernini, A., Ciutti, A., Spiga, O., Scarselli, M., Klein, S., Vannetti, S., Bracci, L., Lozzi, L., Lelli, B., Falciani, C., Neri, P., and Niccolai, N. (2004) NMR and MD studies on the interaction between ligand peptides and α -bungarotoxin. *J. Mol. Biol.* **339**, 1169–1177.
- (48) Bernini, A., Spiga, O., Ciutti, A., Chiellini, S., Bracci, L., Yan, X., Zheng, B., Huang, J., He, M. L., Song, H. D., Hao, P., Zhao, G., and Niccolai, N. (2004) Prediction of quaternary assembly of SARS coronavirus peplomer. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **325**, 1210–1214.
- (49) Bernini, A., Spiga, O., Ciutti, A., Scarselli, M., Bottoni, G., Mascagni, P., and Niccolai, N. (2004) NMR studies of the inclusion

- complex between beta-cyclodextrin and paroxetine. *Eur. J. Pharm. Sci.* 22, 445–450.
- (50) Bracci, L., Pini, A., Bernini, A., Lelli, B., Ricci, C., Scarselli, M., Niccolai, N., and Neri, P. (2003) Biochemical filtering of a protein-protein docking simulation identifies the structure of a complex between a recombinant antibody fragment and alpha-bungarotoxin. *Biochem. J.* 371, 423–7.
- (51) Lozzi, L., Lelli, B., Runci, Y., Scali, S., Bernini, A., Falciani, C., Pini, A., Niccolai, N., Neri, P., and Bracci, L. (2003) Rational design and molecular diversity for the construction of anti- α -bungarotoxin antidotes with high affinity and in vivo efficiency. *Chem. Biol.* 10, 411–417.
- (52) Niccolai, N., Spiga, O., Bernini, A., Scarselli, M., Ciutti, A., Fiaschi, I., Chiellini, S., Molinari, H., and Temussi, P. A. (2003) NMR studies of protein hydration and TEMPOL accessibility. *J. Mol. Biol.* 332, 437–447.
- (53) Scarselli, M., Padula, M. G., Bernini, A., Spiga, O., Ciutti, A., Leoncini, R., Vannoni, D., Marinello, E., and Niccolai, N. (2003) Structure and function correlations between the rat liver threonine deaminase and aminotransferases. *Biochim. Biophys. Acta - Proteins Proteomics* 1645, 40–48.
- (54) Spiga, O., Bernini, A., Ciutti, A., Chiellini, S., Menciasci, N., Finetti, F., Causarano, V., Anselmi, F., Prischi, F., and Niccolai, N. (2003) Molecular modelling of S1 and S2 subunits of SARS coronavirus spike glycoprotein. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 310, 78–83.
- (55) Anselmi, C., Bernini, A., Buonocore, A., Centini, M., Paoli, M. L., and Segal, A. (2002) Comparison of the conformation of floral odorants: An NMR and molecular dynamics study. *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2.*
- (56) Bracci, L., Lozzi, L., Pini, A., Lelli, B., Falciani, C., Niccolai, N., Bernini, A., Spreafico, A., Soldani, P., and Neri, P. (2002) A branched peptide mimotope of the nicotinic receptor binding site is a potent synthetic antidote against the snake neurotoxin alpha-bungarotoxin. *Biochemistry* 41, 10194–10199.
- (57) Scarselli, M., Spiga, O., Ciutti, A., Bernini, A., Bracci, L., Lelli, B., Lozzi, L., Calamandrei, D., Di Maro, D., Klein, S., and Niccolai, N. (2002) NMR structure of α -bungarotoxin free and bound to a mimotope of the nicotinic acetylcholine receptor. *Biochemistry* 41, 1457–1463.
- (58) Spiga, O., Bernini, A., Scarselli, M., Giovannoni, L., Laschi, F., Neri, P., Bracci, L., Lozzi, L., and Niccolai, N. (2002) Histidyl tags and structural stabilization of linear peptides. *Spectrosc. Lett.* 35.
- (59) Spiga, O., Bernini, A., Scarselli, M., Ciutti, A., Bracci, L., Lozzi, L., Lelli, B., Di Maro, D., Calamandrei, D., and Niccolai, N. (2002) Peptide-protein interactions studied by surface plasmon and nuclear magnetic resonances. *FEBS Lett.* 511, 33–35.
- (60) Spiga, O., Bernini, A., Scarselli, M., Ciutti, A., Giovannoni, L., Laschi, F., Bracci, L., and Niccolai, N. (2002) NMR studies on Ni(II) induced cyclization of a histidine-tagged peptide. *J. Pept. Sci.* 8, 634–641.
- (61) Spiga, O., Scarselli, M., Bernini, A., Ciutti, A., Giovannoni, L., Laschi, F., Bracci, L., and Niccolai, N. (2002) Metal ion complexation and folding of linear peptides. *Biophys. Chem.* 97, 79–86.
- (62) Bracci, L., Pini, A., Lozzi, L., Lelli, B., Battestin, P., Spreafico, A., Bernini, A., Niccolai, N., and Neri, P. (2001) Mimicking the nicotinic receptor binding site by a single chain Fv selected by competitive panning from a synthetic phage library. *J. Neurochem.* 78, 24–31.
- (63) Niccolai, N., Spadaccini, R., Scarselli, M., Bernini, A., Crescenzi, O., Spiga, O., Ciutti, A., Di Maro, D., Bracci, L., Dalvit, C., and Temussi, P. A. (2001) Probing the surface of a sweet protein: NMR study of MNEI with a paramagnetic probe. *Protein Sci.* 10, 1498–1507.
- (64) Niccolai, N., Ciutti, A., Spiga, O., Scarselli, M., Bernini, A., Bracci, L., Di Maro, D., Dalvit, C., Molinari, H., Esposito, G., and Temussi, P. A. (2001) NMR Studies of Protein Surface Accessibility. *J. Biol. Chem.* 276, 42455–42461.
- (65) Di Maro, D., Scarselli, M., Bernini, A., Cresti, S., Rossolini, G. M., Lozzi, L., Neri, P., and Niccolai, N. (1999) On the structural stability of a small bioactive peptide of potential use in biotechnology. *J. Biomol. Struct. Dyn.* 16.
- (66) Scarselli, M., Bernini, A., Segoni, C., Molinari, H., Esposito, G., Lesk, A. M., Laschi, F., Temussi, P., and Niccolai, N. (1999) Tendamistat surface accessibility to the TEMPOL paramagnetic probe. *J. Biomol. NMR* 15, 125–133.
- (67) Scarselli, M., Esposito, G., De Magistris, M. T., Domenighini, M., Rappuoli, R., Burrone, G., Bernini, A., and Niccolai, N. (1998) NMR studies on the structure/function correlations of T-cell-epitope analogs from pertussis toxin. *Eur. J. Biochem.* 254.

Autorizzo il trattamento dei dati personali contenuti nel mio curriculum vitae in base all'art. 13 del D. Lgs. 196/2003 e all'art. 13 del Regolamento UE 2016/679 relativo alla protezione delle persone fisiche con riguardo al trattamento dei dati personali.

Siena, 01/10/2019