

## **ALLEGATO B**

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n.\_1\_ posto/i di Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24, comma 3, lettera b) della Legge 240/2010 per il settore concorsuale \_\_02/D1 - Fisica Applicata, Didattica e Storia della Fisica\_\_, settore scientifico-disciplinare \_\_\_\_\_FIS/07 - Fisica Applicata\_\_\_\_\_ presso il Dipartimento di \_\_\_\_Biotecnologie mediche e medicina traslazionale\_\_\_\_\_, (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. \_\_7\_\_ del \_\_27/01/2023\_\_) Codice concorso \_\_5203\_\_

## **[Francesco Tavanti] CURRICULUM VITAE**

**(N.B. IL CURRICULUM NON DEVE ECCEDERE LE 30 PAGINE E DEVE CONTENERE GLI ELEMENTI CHE IL CANDIDATO RITIENE UTILI AI FINI DELLA VALUTAZIONE.**

**LE VOCI INSERITE NEL FACSIMILE SONO A TITOLO PURAMENTE ESEMPLIFICATIVO E POSSONO ESSERE SOSTITUITE, MODIFICATE O INTEGRATE)**

### **INFORMAZIONI PERSONALI (NON INSERIRE INDIRIZZO PRIVATO E TELEFONO FISSO O CELLULARE)**

COGNOME	TAVANTI
NOME	FRANCESCO
DATA DI NASCITA	24/08/1986

### **TITOLI**

#### **TITOLO DI STUDIO**

*(indicare la Laurea conseguita inserendo titolo, Ateneo, data di conseguimento, ecc.)*

Laurea triennale in Fisica presso Università degli studi di Siena. Votazione 99/110

Titolo della tesi: Studio sperimentale dell'effetto LIAD da PDMS e vetro poroso Relatore: Prof. Moi Luigi

Co-relatore: Dr. Burchianti Alessia

dal 28-09-2005 al 08-07-2009

Laurea magistrale in Fisica, indirizzo Fisica Medica, presso Università di Pisa. Votazione conseguita 107/110.

Titolo della tesi: Dinamica molecolare delle rodopsine con modelli multi-scala

Relatore: Dr. Tozzini Valentina

dal 18-09-2009 al 17-07-2013

#### **TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA O EQUIVALENTI, OVVERO, PER I SETTORI INTERESSATI, DEL DIPLOMA DI SPECIALIZZAZIONE MEDICA O EQUIVALENTE, CONSEGUITO IN ITALIA O ALL'ESTERO**

*(inserire titolo, ente, data di conseguimento, ecc.)*

Dottorato presso Università degli studi di Modena e Reggio Emilia, Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche. Progetto del gruppo di Chimica computazionale (Prof. Menziani Maria Cristina, Prof. Pedone Alfonso) dell'Università degli studi di Modena e Reggio Emilia dal 01-01-2014 al 31-12-2016. Dottorato conseguito in data 06/04/2017

## **CONTRATTI DI RICERCA, ASSEGNI DI RICERCA O EQUIVALENTI**

*(per ciascun contratto stipulato, inserire università/ente, data di inizio e fine, ecc.)*

- Postdoctoral researcher presso Università degli studi di Modena e Reggio Emilia, Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche. Progetto del gruppo di Chimica computazionale (Prof. Menziani Maria Cristina, Prof. Pedone Alfonso) dell'Università degli studi di Modena e Reggio Emilia negli ambiti dei progetti FAR 2015 (Rational design of curcumin-based bifunctional ligands for early diagnosis and therapy of Alzheimer's disease) dal 01-01-2017 al 31-12-2018
- Postdoctoral researcher presso Università degli studi di Modena e Reggio Emilia, Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche. Progetto del gruppo di Chimica computazionale (Prof. Menziani Maria Cristina, Prof. Pedone Alfonso) dell'Università degli studi di Modena e Reggio Emilia negli ambiti dei progetti FAR Junior 2018 di UniMoRe (Computer-aided Rational Design of Functionalized Gold Nanoparticles as Inhibitors of Amyloid- $\beta$  Oligomerization for Alzheimer's Disease Treatment) dal 01-01-2019 al 31-12-2019
- Researcher nel gruppo di Fisica Teorica della Materia (Dr. Calzolari Arrigo) del CNR NANO di Modena nell'ambito del progetto europeo INTERSECT (Interoperable Material-to-device simulation box for disruptive electronics) con ccontratto da C.C.N.L. dal 15-01-2020 al 30-04-2022
- Senior post-doc nel gruppo di Fisica Teorica della Materia (Dr. Calzolari Arrigo) del CNR NANO di Modena nell'ambito del progetto europeo OPENMODEL (Integrated Open Access Materials Modelling Innovation Platform for Europe) dal 01-05-2022 a oggi

## **ATTIVITÀ DIDATTICA A LIVELLO UNIVERSITARIO IN ITALIA O ALL'ESTERO**

*(inserire periodo [gg/mm/aa inizio e fine], anno accademico, ateneo, corso laurea, numero ore, ecc.)*

- Incarico di insegnamento di "Fisica applicata" (assimilabile a Fisica di base) per il corso di Tecniche di neurofisiopatologia presso l'Università di Firenze, Dipartimento di Scienze biomediche, sperimentali e cliniche Mario Serio per l'anno accademico 2021/2022, primo semestre. Il corso ha durata di 24 ore e 2 CFU. Il settore è FIS/07
- Incarico di insegnamento di "Fisica applicata" (assimilabile a Fisica di base) per il corso di Odontoiatria e protesi dentaria presso l'Università di Firenze, Dipartimento di Scienze biomediche, sperimentali e cliniche Mario Serio per l'anno accademico 2021/2022, primo semestre. Il corso ha durata di 12 ore e 1 CFU. Il settore è FIS/07 dal
- Incarico di insegnamento di "Fisica applicata" (assimilabile a Fisica di base) per il corso di Tecniche ortopediche presso l'Università di Firenze, Dipartimento di Scienze biomediche, sperimentali e cliniche Mario Serio per l'anno accademico 2021/2022, primo semestre. Il corso ha durata di 24 ore e 2 CFU. Il settore è FIS/07
- Incarico di insegnamento di "Fisica applicata" (assimilabile a Fisica di base) per il corso di Tecniche ortopediche presso l'Università di Firenze, Dipartimento di Scienze biomediche, sperimentali e cliniche Mario Serio per l'anno accademico 2022/2023, primo semestre. Il corso ha durata di 24 ore e 2 CFU. Il settore è FIS/07 dal 06-10-2022 a oggi
- Incarico di insegnamento di Fisica gruppo 2 (seconda parte) (assimilabile a Fisica di base) presso Accademia militare di Modena, corso di laurea in Scienze Strategiche (Dipartimento di Giurisprudenza) presso Università di Modena e Reggio Emilia. 45 ore, FIS/01, dall'anno accademico 2021-2022 a oggi (2022-2023)
- Ho tenuto il corso intitolato "Molecular Dynamics: from theory to applications" per il corso di dottorato riconosciuto dal ministero in 'Models and Methods for Material and Environmental Sciences' presso Dipartimento di scienze chimiche e geologiche all'Università degli studi di Modena e Reggio Emilia, 01-02 settembre 2022. 8 ore di docenza per 3 CFU. dal 01-09-2022 al 02-09-2022

## **DOCUMENTATA ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA PRESSO QUALIFICATI ISTITUTI ITALIANI O STRANIERI;**

*(inserire anno accademico, ente, corso, periodo, ecc.)*

Attività di ricerca come visiting student presso Massachusetts Institute of Technology (MIT) USA presso il gruppo del Prof. Alexander-Katz Alfredo durante il programma di outgoing del dottorato di Models and Methods for Material and

Environmental Sciences (UniMoRe). Periodo di 5 mesi, da 01/06/2015 al 02/11/2015. Il lavoro di ricerca è testimoniato dalle pubblicazioni

- *PNAS*, 2020, **117**, 6866-6874
- *ACS Chem. Neuro.*, 2020, **11**, 3153-3160.

dal 01-06-2015 al 02-11-2015

## **DOCUMENTATA ATTIVITÀ IN CAMPO CLINICO**

*(indicare, data, durata, ruolo, ente presso il quale si è prestata attività assistenziale, ecc.)*

--

## **REALIZZAZIONE DI ATTIVITÀ PROGETTUALE**

*(indicare, data, progetto, ecc.)*

- Responsabile (PI) del progetto di ricerca dal titolo "Proteins corona formation on gold nanoparticles". Premio 75'000 ore di calcolo CPU sul cluster Galileo presso CINECA (Italy). Progetto condotto presso Università di Modena e Reggio Emilia riguardante lo studio di assorbimento di proteine su nanoparticelle di oro dal 01-03-2015 al 01-09-2015
- Responsabile (PI) del progetto di ricerca dal titolo "Gold nanoparticles interacting with Alzheimer's fibrils". Premio 35'000 ore di calcolo CPU sul cluster Galileo presso CINECA (Italy). Progetto condotto presso Università di Modena e Reggio Emilia riguardante lo studio di interazione tra nanoparticelle di oro e fibre dell'Alzheimer dal 01-03-2016 al 01-09-2016
- Collaboratore, insieme alla Prof. Menziani Maria Cristina, del progetto PRACE – Preparatory Access (2016) dal titolo "Insight into Silver Nanocube-protein interaction by computational simulations", Premio: Fermi@CINECA (Tier 0), 100'000 ore di CPU e MareNostrum@BSC-CNS (Tier 0), 50'000 ore di CPU. dal 01-06-2016 al 31-12-2016
- Responsabile (PI) del progetto di ricerca dal titolo "Curcumin-like compounds for Amyloid Inhibition". Premio 26'000 ore di calcolo CPU sul cluster Marconi presso CINECA (Italy). Progetto condotto presso Università di Modena e Reggio Emilia riguardante lo studio di interazione tra derivati sintetici della curcumina e fibre dell'Alzheimer dal 01-02-2017 al 01-07-2017
- Nel 2019 sono stato Responsabile Scientifico (PI) del progetto di ateneo (Università di Modena e Reggio Emilia) presentati da giovani ricercatori dell'ateneo nel 2018. Il bando prevedeva la scrittura di un progetto e la revisione di questo da esperti (reviewers) esterni all'ateneo di Modena e Reggio Emilia. Il titolo del progetto è "Computer-aided rational design of functionalized gold nanoparticles as inhibitors of amyloid-B oligomerization for Alzheimer's disease treatment". Come fondi sono stati assegnati 32'000 euro utilizzati per il mio stipendio da assegnista, l'acquisto di computer e servizi per lo svolgimento del progetto e per la partecipazione a congressi nazionali ed internazionali. Dal progetto sono scaturiti 5 articoli su riviste internazionali indicizzate su WOS e Scopus e la partecipazione a 5 tra workshops/scuole e conferenze sia a livello nazionale che internazionale, anche in qualità di relatore di presentazioni orali. Il progetto è stato ideato, scritto e gestito sia scientificamente che finanziariamente interamente dal sottoscritto dal 01-01-2019 al 31-12-2019
- Responsabile (PI) del progetto di ricerca dal titolo "Molecular dynamics to elucidate the structure of amorphous GeSe systems". Premio 5'400 ore di calcolo GPU sul cluster Galileo2 presso CINECA (Italy). Progetto condotto presso CNR NANO di Modena riguardante lo studio di sistemi disordinati basati su calcogenuri dal 01-02-2020 al 01-07-2020
- Responsabile (PI) del progetto europeo PRACE-ICEI (2020) dal titolo "Structural features of novel chalcogenides for passive memory applications", Premio 5'000'000 ore di calcolo CPU presso JUSUF (DE). Progetto condotto al CNR NANO di Modena per lo studio estensivo di sistemi GeSe a diverse concentrazioni dal 01-12-2020 al 01-12-2021
- Responsabile (PI) del progetto italiano ISCRA B (2022) dal titolo "Electronic structure calculations of doped chalcogenides", 144'000 node hours presso Marconi100 (CINECA). Progetto condotto presso CNR NANO di Modena riguardante lo studio estensivo di sistemi di GeSe con molte concentrazioni di dopanti dal 01-03-2022 a oggi
- Sono collaboratore (under 40) nel progetto dal titolo "Theranostics in gastric cancer through immunotargeting of the CSPG4 cell surface proteoglycan" nell'ambito del progetto PNRR Salute 2022. Il progetto è stato approvato il 30/10/2022 ed è finanziato con 993'000 euro. La mia ricerca verrà condotta presso l'università di Parma, Prof. Perris Roberto. La data indicativa di inizio del progetto è il 01/03/2023. dal 01-03-2023 a oggi

## ORGANIZZAZIONE, DIREZIONE E COORDINAMENTO DI GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI, O PARTECIPAZIONE AGLI STESSI

(per ciascuna voce inserire anno, ruolo, gruppo di ricerca, ecc.)

- Partecipazione alle attività di ricerca del gruppo di Fisica Teorica della Materia (Dr. Calzolari Arrigo) del CNR NANO di Modena nell'ambito del progetto europeo OPENMODEL (Integrated Open Access Materials Modelling Innovation Platform for Europe). Il lavoro di ricerca è testimoniato dalle pubblicazioni
  - *Adv. Elec. Mater.*, 2023, 2201224,
  - *ACS Omega*, 2022, **7**, 23255-23264
  - *IEEE Transactions on Electronic Devices*, 2023 10.1109/TED.2023.3242229dal 01-05-2011 a oggi
- Partecipazione alle attività di ricerca del gruppo di Fisica Teorica della Materia (Dr. Calzolari Arrigo) del CNR NANO di Modena nell'ambito del progetto europeo INTERSECT (Interoperable Material-to- device simulation box for disruptive electronics). Il lavoro di ricerca è testimoniato dalle pubblicazioni
  - *Adv. Elec. Mater.*, 2023, 2201224,
  - *ACS Omega*, 2022, **7**, 23255-23264,
  - *IEEE Transactions on Electronic Devices*, 2023 10.1109/TED.2023.3242229,
  - *Comp. Mater. Sci.*, 2022, **209**, 111381
  - *ACS Appl. El. Mater.* 2020, **2**, 2961-2969.dal 15-01-2012 al 30-04-2022
- Partecipazioni alle attività di ricerca del gruppo di Chimica computazionale (Prof. Menziani Maria Cristina, Prof. Pedone Alfonso) dell'Università degli studi di Modena e Reggio Emilia negli ambiti dei progetti PRIN (Nanoscale functional Organization of (bio)Molecules and Hybrids for targeted Application in Sensing, Medicine and Biotechnology), FIRB (Novel Multi- scale Theoretical/Computational Strategies for the Design of Photo and Thermo responsive Hybrid Organic– Inorganic Components for Nanoelectronic Circuits) e FAR Junior 2018 di UniMoRe (Computer-aided Rational Design of Functionalized Gold Nanoparticles as Inhibitors of Amyloid- $\beta$  Oligomerization for Alzheimer's Disease Treatment). Il lavoro di ricerca è testimoniato dalle pubblicazioni
  - *PNAS*, 2020, **117**, 6866-6874,
  - *New J. Chem.*, 2019, **43**, 17946-17953,
  - *Int. J. Mol. Sci.*, 2019, **20**, 3539,
  - *ACS Applied Materials and Interfaces*, 2019, **11**, 34645-34651,
  - *New J. Chem.*, 2019, **43**, 6834-6837,
  - *Bioorg. Med. Chem.*, 2018, **26**, 4288-4300,
  - *Molecules*, 2018, **23**, 1320,
  - *J. Phys. Chem. B*, 2017, **121**, 9532–9540,
  - *Bioconjugate Chemistry*, 2017, **28**, 2569-2574,
  - *ACS Nano*, 2017, **11**, 918-926,
  - *J. Phys. Chem. C*, 2015, **119**, 22172-22180
  - *New J. Chem.*, 2015, **39**, 2474-2482dal 01-01-2014 al 25-12-2016

## TITOLARITÀ DI BREVETTI

(per ciascun brevetto, inserire autori, titolo, tipologia, numero brevetto, ecc.)

--

## ATTIVITÀ DI RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI E INTERNAZIONALI

(inserire titolo congresso/convegno, data, ecc.)

1. **Tavanti F.**, Slassi A., Calzolari A., “Going deeper on the structural and electronical properties of amorphous  $\text{Ge}_x\text{Se}_{1-x}$ : a microscopic investigation”, Intersect workshop, Barcelona, 10-12 november 2021.
2. **Tavanti F.**, Dianat B., Catellani A., Calzolari A. “Amorphous  $\text{Ge}_x\text{Se}_{1-x}$  and its hierarchical structures by mean of molecular dynamics simulations”, APS march meeting, 13-19 March 2021.
3. **Tavanti F.**, Pedone, A., Menziani, M. C. “Computational Simulations of the interaction between Gold Nanoparticles and Biological Medium”, CECAM workshop Biomolecular mechanisms at functionalized solid surfaces, Paris, 14-17 May 2019.
4. **Tavanti F.**, Pedone, A., Menziani, M. C., “Gold Nanoparticles as Amyloid- $\beta$  fibril inhibitors”, Extended Software Development Workshop (ESDW) at E-CAM, Lyon, 09 April 2019.

5. **Tavanti F.**, “CHI (ri)CERCA, TROVA”, scientific disclosure at secondary school G. Marcelli, Foiano della Chiana (Ar), Italy, 23 March 2019.
6. **Tavanti, F.**, Pedone, A., Menziani, M. C., “Understanding the Gold Nanoparticles-Proteins Interactions by Molecular Dynamics Simulations”, Molecular Dynamics Today MD2 meeting, Bologna, Italy, March 14-15 2019.
7. **Tavanti, F.**, Ferrari E., Pedone, A., Menziani, M. C. “Computational Study of Curcumin-derivatives for Alzheimer’s Disease Treatment”, Italian Chemical Society, Paestum (Sa), Italy, September 10-14 2017.
8. **Tavanti, F.**, Pedone, A., Menziani, M. C. “*Specific Interactions of Gold Nanoparticles with Amyloid- $\beta$  fibrils*”. Italian Chemical Society, DCTC 2015, Rome, Italy, December 14-16, 2015.
9. **Tavanti, F.**, Pedone, A., Menziani, M. C. “*Monolayer-protected Gold Nanoparticles interacting with Amyloid- $\beta$  fibrils: a Computational Study*”. Giornata della Chimica dell’Emilia Romagna, Modena, Italy, December 18, 2015.

**CONSEGUIMENTO DI PREMI E RICONOSCIMENTI NAZIONALI E INTERNAZIONALI PER ATTIVITÀ DI RICERCA**  
(inserire premio, data, ente organizzatore, ecc.)

- Vincitore del video contest "Present your research in 150 seconds" promosso dalla ChemPubSoc Europe e dalla Young group dell'Austrian Chemistry Association, 2017. Per questo premio ho realizzato un video di carattere divulgativo riguardante la mia ricerca  
<http://www.jungchemiker.at/en/150seconds.php>  
Premio 200€ e la pubblicazione di un articolo di carattere divulgativo su ChemistryViews:  
DOI: 10.1002/chemv.201900037  
dal 01-07-2017 al 31-07-2017
- Journal cover (front cover) della rivista ACS Bioconjugate Chemistry, vol. 28, issue 10, 2017, conferita per il lavoro "Synthesis, Characterization and Selective Delivery of DARP-in Gold Nanoparticles Conjugates to Cancer Cells".  
dal 14-08-2017 al 14-08-2017
- Menzione come uno dei 10 migliori articoli pubblicati nel 2017 da un socio giovane della Società di Chimica Italiana. La menzione è stata assegnata durante la procedura del premio Primo Levi 2017 rivolto ad un socio giovane della Società di Chimica Italiana. L'articolo di riferimento è "Site-selective surface-enhanced raman detection of proteins" pubblicato su ACS Nano 2017.  
dal 24-05-2018 al 24-05-2018
- Menzione come "Most popular video" durante la fase finale del premio Primo Levi 2017. Durante questa fase i candidati dovevano produrre un video di carattere divulgativo sulla tematica dell'articolo "Site-selective surface-enhanced raman detection of proteins". Il mio video è stato quello che ha ricevuto più visualizzazioni e likes sui social networks.  
dal 01-10-2018 al 01-10-2018
- Journal cover (front cover) della rivista ACS Chemical Neurosciences, vol. 11, issue 22, 2020, conferita per il lavoro dal titolo "Computational insights into the binding of monolayer-capped gold nanoparticles onto Amyloid- $\beta$  fibrils" in cui risulterei come Primo Autore e Corresponding Author  
dal 18-11-2020 al 18-11-2020
- Journal cover (front cover) della rivista ACS Omega, vol. 7, issue 27, 2022, conferita per il lavoro "Multi-technique approach to unravel the (dis) order in amorphous materials" in cui risulterei come Primo Autore e Corresponding Author  
dal 24-06-2022 al 24-06-2022

**POSSESSO DEL DIPLOMA DI SPECIALIZZAZIONE EUROPEA RICONOSCIUTO DA BOARD INTERNAZIONALI**  
(relativamente a quei settori concorsuali nei quali è prevista)  
(indicare diploma, data di conseguimento, ecc.)

--

**TITOLI DI CUI ALL'ARTICOLO 24 COMMA 3 LETTERA A) E B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240**  
(indicare se contratto di tipologia A o B, Ateneo, data di decorrenza e fine contratto, ecc.)

--

**INDICATORI BIBBLIOMETRICI**

Al 14 febbraio 2023, ho 29 articoli pubblicati, 471 citazioni, h-index = 12. Fonte Scopus

## PRODUZIONE SCIENTIFICA

### PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE AI FINI DELLA VALUTAZIONE

(per ciascuna pubblicazione indicare: nomi degli autori, titolo completo, casa editrice, data e luogo di pubblicazione, codice ISBN, ISSN, DOI o altro equivalente)

1. **Tavanti, F.**; Calzolari, A. Multi-Technique Approach to Unravel the (Dis)Order in Amorphous Materials. *ACS Omega* **2022**, 7, 23255–23264, doi:10.1021/acsomega.2c01359.
2. **Tavanti, F.**; Pedone, A.; Menziani, M.C. Competitive Binding of Proteins to Gold Nanoparticles Disclosed by Molecular Dynamics Simulations. *J. Phys. Chem. C* **2015**, 119, 22172–22180, doi:10.1021/acs.jpcc.5b05796.
3. **Tavanti, F.**; Pedone, A.; Menziani, M.C.; Alexander-Katz, A. Computational Insights into the Binding of Monolayer-Capped Gold Nanoparticles onto Amyloid- $\beta$  Fibrils. *ACS Chem. Neurosci.* **2020**, 11, 3153–3160, doi:10.1021/acscchemneuro.0c00497.
4. Cendrowska, U.; Silva, P.J.; Ait-Bouziad, N.; Müller, M.; Guven, Z.P.; Vieweg, S.; Chiki, A.; Radamaker, L.; Kumar, S.T.; Fändrich, M.; **Tavanti, F.**; Menziani, M.C.; Alexander-Katz, A.; Stellacci, F.; Lashuel, H. A. Unraveling the Complexity of Amyloid Polymorphism Using Gold Nanoparticles and Cryo-EM. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **2020**, 117, 6866–6874, doi:10.1073/pnas.1916176117.
5. Deyev, S.; Proshkina, G.; Ryabova, A.; **Tavanti, F.**; Menziani, M.C.; Eidelstein, G.; Avishai, G.; Kotlyar, A. Synthesis, Characterization, and Selective Delivery of DARPin–Gold Nanoparticle Conjugates to Cancer Cells. *Bioconjugate Chem.* **2017**, 28, 2569–2574, doi:10.1021/acs.bioconjchem.7b00410.
6. Matteini, P.; Cottat, M.; **Tavanti, F.**; Panfilova, E.; Scuderi, M.; Nicotra, G.; Menziani, M.C.; Khlebtsov, N.; de Angelis, M.; Pini, R. Site-Selective Surface-Enhanced Raman Detection of Proteins. *ACS Nano* **2017**, 11, 918–926, doi:10.1021/acsnano.6b07523.
7. Proshkina, G.; Deyev, S.; Ryabova, A.; **Tavanti, F.**; Menziani, M.C.; Cohen, R.; Katrivas, L.; Kotlyar, A. DARPin 9-29-Targeted Mini Gold Nanorods Specifically Eliminate HER2-Overexpressing Cancer Cells. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2019**, 11, 34645–34651, doi:10.1021/acsami.9b10441.
8. Slassi, A.; Medondjio, L.-S.; Padovani, A.; **Tavanti, F.**; He, X.; Klima, S.; Garbin, D.; Kaczer, B.; Larcher, L.; Ordejón, P.; et al. Device-to-Materials Pathway for Electron Traps Detection in Amorphous GeSe-Based Selectors. *Advanced Electronic Materials* **2023**, n/a, 2201224, doi:10.1002/aelm.202201224.
9. **Tavanti, F.**; Pedone, A.; Menziani, M. C. Disclosing the Interaction of Gold Nanoparticles with A $\beta$ (1–40) Monomers through Replica Exchange Molecular Dynamics Simulations. *International Journal of Molecular Sciences* **2021**, 22, 26, doi:10.3390/ijms22010026.
10. **Tavanti, F.**; Menziani, M.C. Computational Insight on the Interaction of Common Blood Proteins with Gold Nanoparticles. *International Journal of Molecular Sciences* **2021**, 22, doi:10.3390/ijms22168722.
11. **Tavanti, F.**; Pedone, A.; Menziani, M.C. Insights into the Effect of Curcumin and (–)-Epigallocatechin-3-Gallate on the Aggregation of A $\beta$ (1–40) Monomers by Means of Molecular Dynamics. *Int. J. Mol. Sci.* **2020**, 5462, doi:10.3390/ijms21155462.
12. **Tavanti, F.**; Pedone, A.; Menziani, M.C. Multiscale Molecular Dynamics Simulation of Multiple Protein Adsorption on Gold Nanoparticles. *International Journal of Molecular Sciences* **2019**, 20, doi:10.3390/ijms20143539.

### TUTTE LE PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE DEL CANDIDATO

1. **Tavanti, F.**; Tozzini, V. A Multi-Scale–Multi-Stable Model for the Rhodopsin Photocycle. *Molecules* **2014**, 19, 14961–14978, doi:10.3390/molecules190914961.
2. **Tavanti, F.**; Pedone, A.; Menziani, M.C. A Closer Look into the Ubiquitin Corona on Gold Nanoparticles by Computational Studies. *New J. Chem.* **2015**, 39, 2474–2482, doi:10.1039/C4NJ01752H.
3. **Tavanti, F.**; Pedone, A.; Menziani, M.C. Competitive Binding of Proteins to Gold Nanoparticles Disclosed by Molecular Dynamics Simulations. *J. Phys. Chem. C* **2015**, 119, 22172–22180, doi:10.1021/acs.jpcc.5b05796.
4. Muniz-Miranda, F.; Lodesani, F.; **Tavanti, F.**; Presti, D.; Malferrari, D.; Pedone, A. Supercritical CO<sub>2</sub> Confined in Palygorskite and Sepiolite Minerals: A Classical Molecular Dynamics Investigation. *J. Phys. Chem. C* **2016**, 120, 26945–26954, doi:10.1021/acs.jpcc.6b09983.
5. Matteini, P.; Cottat, M.; **Tavanti, F.**; Panfilova, E.; Scuderi, M.; Nicotra, G.; Menziani, M.C.; Khlebtsov, N.; de Angelis, M.; Pini, R. Site-Selective Surface-Enhanced Raman Detection of Proteins. *ACS Nano* **2017**, 11, 918–926, doi:10.1021/acsnano.6b07523.
6. Deyev, S.; Proshkina, G.; Ryabova, A.; **Tavanti, F.**; Menziani, M.C.; Eidelstein, G.; Avishai, G.; Kotlyar, A. Synthesis, Characterization, and Selective Delivery of DARPin–Gold Nanoparticle Conjugates to Cancer Cells. *Bioconjugate Chem.* **2017**, 28, 2569–2574, doi:10.1021/acs.bioconjchem.7b00410.
7. **Tavanti, F.**; Pedone, A.; Matteini, P.; Menziani, M.C. Computational Insight into the Interaction of Cytochrome C with Wet and PVP-Coated Ag Surfaces. *J. Phys. Chem. B* **2017**, 121, 9532–9540,

doi:10.1021/acs.jpcb.7b07492.

8. Malferrari, D.; Bernini, F.; **Tavanti, F.**; Tuccio, L.; Pedone, A. Experimental and Molecular Dynamics Investigation Proves That Montmorillonite Traps the Biogenic Amines Histamine and Tyramine. *J. Phys. Chem. C* **2017**, *121*, 27493–27503, doi:10.1021/acs.jpcc.7b09804.
9. **Tavanti, F.**; Muniz-Miranda, F.; Pedone, A. The Effect of Alkaline Cations on the Intercalation of Carbon Dioxide in Sepiolite Minerals: A Molecular Dynamics Investigation. *Frontiers in Materials* **2018**, *5*, doi:10.3389/fmats.2018.00012.
10. **Tavanti, F.**; Pedone, A.; Menziani, M.C. Computational Insight into the Effect of Natural Compounds on the Destabilization of Preformed Amyloid- $\beta$ (1–40) Fibrils. *Molecules* **2018**, *23*, 1320, doi:10.3390/molecules23061320.
11. Orteca, G.; **Tavanti, F.**; Bednarikova, Z.; Gazova, Z.; Rigillo, G.; Imbriano, C.; Basile, V.; Asti, M.; Rigamonti, L.; Saladini, M.; et al. Curcumin Derivatives and A $\beta$ -Fibrillar Aggregates: An Interactions' Study for Diagnostic/Therapeutic Purposes in Neurodegenerative Diseases. *Bioorganic & Medicinal Chemistry* **2018**, *26*, 4288–4300, doi:10.1016/j.bmc.2018.07.027.
12. Pedone, A.; **Tavanti, F.**; Malavasi, G.; Menziani, M.C. An Atomic-Level Look at the Structure-Property Relationship of Cerium-Doped Glasses Using Classical Molecular Dynamics. *Journal of Non-Crystalline Solids* **2018**, *498*, 331–337, doi:10.1016/j.jnoncrsol.2018.03.040.
13. Paolino, M.; Reale, A.; Razzano, V.; Giuliani, G.; Donati, A.; Bonechi, C.; Caselli, G.; Visintin, M.; Makovec, F.; Scialabba, C.; Licciardi, M.; Paccagnini, E.; Gentile, M.; Salvini, L.; **Tavanti, F.**; Menziani, M. C.; Cappelli, A. Nanoreactors for the Multi-Functionalization of Poly-Histidine Fragments. *New J. Chem.* **2019**, *43*, 6834–6837, doi:10.1039/C9NJ00279K.
14. Paolino, M.; Visintin, M.; Margotti, E.; Visentini, M.; Salvini, L.; Reale, A.; Razzano, V.; Giuliani, G.; Caselli, G.; **Tavanti, F.**; et al. Functionalization of Protein Hexahistidine Tags by Functional Nanoreactors. *New J. Chem.* **2019**, *43*, 17946–17953, doi:10.1039/C9NJ03463C.
15. **Tavanti, F.**; Pedone, A.; Menziani, M.C. Multiscale Molecular Dynamics Simulation of Multiple Protein Adsorption on Gold Nanoparticles. *International Journal of Molecular Sciences* **2019**, *20*, doi:10.3390/ijms20143539.
16. Proshkina, G.; Deyev, S.; Ryabova, A.; **Tavanti, F.**; Menziani, M.C.; Cohen, R.; Katrivas, L.; Kotlyar, A. DARPIn<sub>9-29</sub>-Targeted Mini Gold Nanorods Specifically Eliminate HER2-Overexpressing Cancer Cells. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2019**, *11*, 34645–34651, doi:10.1021/acsami.9b10441.
17. Cendrowska, U.; Silva, P.J.; Ait-Bouziad, N.; Müller, M.; Guven, Z.P.; Vieweg, S.; Chiki, A.; Radamaker, L.; Kumar, S.T.; Fändrich, M.; **Tavanti, F.**; Menziani, M.C.; Alexander-Katz, A.; Stellacci, F.; Lashuel, H. A. Unraveling the Complexity of Amyloid Polymorphism Using Gold Nanoparticles and Cryo-EM. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **2020**, *117*, 6866–6874, doi:10.1073/pnas.1916176117.
18. **Tavanti, F.**; Pedone, A.; Menziani, M.C. Insights into the Effect of Curcumin and (–)-Epigallocatechin-3-Gallate on the Aggregation of A $\beta$ (1–40) Monomers by Means of Molecular Dynamics. *Int. J. Mol. Sci.* **2020**, *5462*, doi:10.3390/ijms21155462.
19. **Tavanti, F.**; Dianat, B.; Catellani, A.; Calzolari, A. Hierarchical Short- and Medium-Range Order Structures in Amorphous GeSe<sub>1–x</sub> for Selectors Applications. *ACS Appl. Electron. Mater.* **2020**, *2*, 2961–2969, doi:10.1021/acsaelm.0c00581.
20. **Tavanti, F.**; Pedone, A.; Menziani, M.C.; Alexander-Katz, A. Computational Insights into the Binding of Monolayer-Capped Gold Nanoparticles onto Amyloid- $\beta$  Fibrils. *ACS Chem. Neurosci.* **2020**, *11*, 3153–3160, doi:10.1021/acschemneuro.0c00497.
21. **Tavanti, F.**; Pedone, A.; Menziani, M.C.; Maria Cristina Disclosing the Interaction of Gold Nanoparticles with A $\beta$ (1–40) Monomers through Replica Exchange Molecular Dynamics Simulations. *International Journal of Molecular Sciences* **2021**, *22*, 26, doi:10.3390/ijms22010026.
22. Lodesani, F.; **Tavanti, F.**; Menziani, M.C.; Maeda, K.; Takato, Y.; Urata, S.; Pedone, A. Exploring the Crystallization Path of Lithium Disilicate through Metadynamics Simulations. *Phys. Rev. Materials* **2021**, *5*, 075602, doi:10.1103/PhysRevMaterials.5.075602.
23. **Tavanti, F.**; Menziani, M.C. Computational Insight on the Interaction of Common Blood Proteins with Gold Nanoparticles. *International Journal of Molecular Sciences* **2021**, *22*, doi:10.3390/ijms22168722.
24. Singh, R.; Hano, C.; **Tavanti, F.**; Sharma, B. Biogenic Synthesis and Characterization of Antioxidant and Antimicrobial Silver Nanoparticles Using Flower Extract of Couroupita Guianensis Aubl. *Materials* **2021**, *14*, doi:10.3390/ma14226854.
25. Dianat, B.; **Tavanti, F.**; Padovani, A.; Larcher, L.; Calzolari, A. BELLO: A Post-Processing Tool for the Local-Order Analysis of Disordered Systems. *Computational Materials Science* **2022**, *209*, 111381, doi:10.1016/j.commatsci.2022.111381.
26. **Tavanti, F.**; Calzolari, A. Multi-Technique Approach to Unravel the (Dis)Order in Amorphous Materials. *ACS Omega* **2022**, *7*, 23255–23264, doi:10.1021/acsomega.2c01359.
27. Slassi, A.; Medondjio, L.-S.; Padovani, A.; **Tavanti, F.**; He, X.; Clima, S.; Garbin, D.; Kaczer, B.; Larcher, L.; Ordejón, P.; et al. Device-to-Materials Pathway for Electron Traps Detection in Amorphous GeSe-Based Selectors. *Advanced Electronic Materials* **2023**, *n/a*, 2201224, doi:10.1002/aeml.202201224.
28. F. Buscemi; E. Piccinini; L. Vandelli; F. Nardi; A. Padovani; B. Kaczer; D. Garbin; S. Clima; R. Degraeve; G. S. Kar; **Tavanti, F.**; Slassi, A.; Calzolari, A.; Larcher, L. A HydroDynamic Model for Trap-Assisted Tunneling

Conduction in Ovonic Devices. *IEEE Transactions on Electron Devices* **2023**, 1–7, doi:10.1109/TED.2023.3242229.  
29. Presti, D.; Muniz-Miranda, F.; **Tavanti, F.**; Pedone, A. Structure Analysis and Properties Calculations. In *Atomistic Simulations of Glasses*; 2022; pp. 89–122 ISBN 978-1-118-93907-9.

Data

14/02/2023

Luogo

Modena