

FORMATO EUROPEO
PER IL CURRICULUM
VITAE



INFORMAZIONI PERSONALI

Nome	CATERINA ARCANGELI
Indirizzo lavorativo	ENEA-CR CASACCIA, VIA ANGUILLARESE 301, 00123 ROMA (ITALIA)
Telefono Ufficio	+39 0630486898
E-mail	caterina.arcangeli@enea.it
Nazionalità	Italiana
Data di nascita	06/05/1970

Indicatori Bibliometrici

h-index = 18 (Google Scholar); 17 (Scopus)
Numero di Citazioni = 1834 (Google Scholar); 1284 (Scopus)
ORCID <https://orcid.org/0000-0002-5459-1024>

ESPERIENZE PROFESSIONALI

24 Febbraio 2009 – oggi

RICERCATRICE
ENEA-CR CASACCIA ROMA, ITALIA

Attività di Ricerca:

Esperta in modellazione e simulazione di macromolecole biologiche, materiali nano-bioderivati e interfacce bio-inorganiche, attualmente si occupa di valutare l'impatto dell'ambiente sulla salute umana e di progettazione e sviluppo di nuovi approcci diagnostici e terapeutici mediante metodologie *in silico*.

Partecipa, in qualità di esperta di simulazioni numeriche di dinamica molecolare, ai seguenti gruppi di lavoro (Task Force) istituiti dal Dipartimento di Sostenibilità:

- “Cantiere della Sostenibilità” nell'ambito del quale redige un Position Paper sui “Sistemi Innovativi per la Salute” (2016);
- “Task Force per l'organizzazione e la pianificazione di ricerche relative alle relazioni Covid-19 e particolato atmosferico e alle conseguenze del lock down sulle emissioni atmosferiche” (2020);
- “Plant Molecular Farming” (2022)

Coordinamento/Partecipazione Progetti

- Partecipa al Progetto nazionale PULVIRUS (2020-2023) finanziato da ENEA il cui obiettivo è comprendere la relazione tra inquinamento atmosferico e diffusione della pandemia, le interazioni fisico-chimico-biologiche tra polveri sottili e virus, e gli effetti del "lock down" sull'inquinamento atmosferico e sui gas serra in Italia. All'interno del progetto è responsabile delle attività tecnico-scientifiche dell' Obiettivo 5.1 - “Studio in silico di modellistica molecolare dell'interazione diretta tra le proteine di superficie del virus SARS-CoV-2 e PM”
- Partecipa al Progetto nazionale NANOCROSS (2018-2022) (Progetto IG n. 20314) finanziato da AIRC dal titolo "Plant virus nanoparticles for blood brain barrier crossing and medulloblastoma targeting". All'interno del progetto è responsabile delle attività del tecnico-scientifiche del Task1 - “BBB and MB targeting peptides selection and in silico

	<p>CPVNs structural characterization"</p> <ul style="list-style-type: none"> • Partecipa al progetto europeo META-Materials Enhancement for Technological Application-Project (2011-2015) (FP7-PEOPLE-2010-IRSES-Marie Curie Actions, PIRSES-GA-2010-269182) il cui obiettivo consiste nello sviluppo di nuovi materiali strutturati funzionalmente e nell'acquisizione di una profonda comprensione della struttura e della dinamica della materia nanostrutturata su scale di lunghezza e tempo multiple. All'interno del progetto, coordinato da Tor Vergata, in qualità di ricercatrice affiliata al centro NAST-Tor Vergata, ha contribuito al design e alla caratterizzazione di interfacce bioinorganiche utili per dispositivi ibridi a DNA a stato solido i per dispositivi biocompatibili per uso biomedico. Nell'ambito dello stesso progetto META è stata visiting scientist nel 2012 presso i Laboratori ORNL di Oak Ridge negli USA. • Principal Investigator (PI) dello <u>Standard HPC Grant</u> (2010) finanziato da CASPUR in termini di ore di calcolo (75000 h/cpu) per il progetto "All-atom Molecular Dynamics Simulation of a large virus-like particle (VLP)"
--	--

16 Luglio 2012 – 17 Settembre 2012

VISITING SCIENTIST

CNMS – CENTER FOR NANOPHASE MATERIAL SCIENCES – OAK RIDGE NATIONAL LABORATORY, OAK RIDGE, TN USA

Progetto: META-Materials Enhancement for Technological Application-Project (FP7-PEOPLE-2010-IRSES-Marie Curie Actions, PIRSES-GA-2010-269182).

Modeling e Simulazione di Interface peptidi-TiO₂ di dispositivi a stato solido idribi a DNA su scala nanometrica

1 Marzo 2005 – 23 Febbraio 2009

RICERCATRICE A TEMPO DETERMINATO

ENEA-CR CASACCIA, ROMA, ITALIA

Progetto: FIRB 2001 E-GEN (RBNE01W7JB).

Modeling e Simulazione di macromolecole biologiche geneticamente ingegnerizzate di interesse biomedico (Anticorpi, Immunoconiugati, Nanoparticelle di origine Virale)

1 Ottobre 2001 – 28 Febraio 2005

ASSEGNO DI RICERCA POST DOTTORATO

DIP. DI FISICA – SCUOLA NORMALE SUPERIORE DI PISA, PISA, ITALIA

Progetto: Dynamics Fluorescence Spectroscopy of single GFP Protein and Real Time Imaging of Proteins in Living Cells

1 Settembre 2000 – 31 Agosto 2001

ASSEGNO DI RICERCA

DIP. DI SCIENZE AMBIENTALI – UNIVERSITA DELLA TUSCIA, VITERBO, ITALIA

Progetto: Molecular Dynamics Simulation of Electron Transfer Proteins

1 Novembre 1999 – 30 Aprile 2000

BORSA DI STUDIO

INFM, ISTITUTO NAZIONALE FISICA DELLA MATERIA – GENOVA, ITALIA

Progetto: Spectroscopy and Molecular Dynamics Simulation of Biomolecules

Novembre 1997 – Gennaio 1998

VISITING SCIENTIST

LFD, DEPT. OF PHYSICS – UNIVERSITY OF ILLINOIS, URBANA-CHAMPAIGN, IL, USA

Progetto: Two-Photon Fluorescence Microscopy

ISTRUZIONE

3 Febbraio 2000

Dottorato in Scienze Ambientali presso Dipartimento di Scienze Ambientali, Università degli Studi della Tuscia, Viterbo, Italia

16 Novembre 1995

Laurea in Scienze Biologiche (110/110 cum laude), Università degli Studi della Tuscia, Viterbo, Italia

1989

Maturità classica preso Liceo Ginnasio "Mariano Buratti", Viterbo, Italia

FORMAZIONE

11 Maggio 2021	The European House Ambrosetti, Milano (Italia) "Data Driven revolution in Life Sciences"
4 Dicembre 2020	Scienze Insieme Progetto NET Corso di formazione on line "Come fare divulgazione scientifica in modo efficace e coinvolgente" Dott. Giovanni Carrada (2h)
8 Aprile – 8 Giugno 2020	ENEA, Roma (Italia) -IBIMi Corso di formazione on line "Project Management e nuovi modelli di leadership" (20h) Ing. A. Moreno
Aprile 2016 - Giugno 2016	ENEA, C.R. Casaccia Roma (Italia) "Str.a.d.i.va.ri – STRESS in Agenzia: Definire l'Intervento attraverso la Valutazione del Rischio" Dott.ssa Paola Antonini, Dott. Bruno Epifani (10 incontri settimanali, 30h)
14 Settembre 2016	APRE, Rome (Italia) Evento "European Research Council (ERC) Giornata Nazionale di Lancio del Work Programme 2017" Dott. Matteo Di Rosa
28 Ottobre 2015	APRE, Rome (Italia) Incontro formativo/informativo "Horizon 2020: come scrivere una proposta di successo" Dott. Matteo Di Rosa
18 Marzo 2015	ZEISS Xradia Workshop sulla Microscopia a raggi X (XRM) Zeiss Xradia "3D X-Ray Microscopy, Principles and Applications in Materials and Life Sciences" (Dr. Antonio Casares)
20 – 22 Ottobre 2008	CASPUR, Rome (Italia) Corso di formazione "Python scripting language"
17 – 21 Ottobre 2005	CINECA, Casalecchio di Reno, Bologna (Italia) Corso di formazione "Perl for Biologist" (Dr. A. Emerson)
12 – 14 Luglio 2005	Interdepartmental Center for Research in Molecular and Clinical Genetics, Dept. of Experimental Pathology, MBIE University of Pisa, Pisa (Italia) Corso "First European Pisa Course on Microarray Data Analysis" (Dr. S. Draghici)
17 – 21 Gennaio 2000	SIBPA, INFN and Istituto Veneto di Scienze Lettere ed Arti, Venezia (Italia) Scuola di Biofisica Pura ed Applicata: Biofisica della Fotosintesi
8 – 12 Marzo 1999	European Molecular Biology Laboratory (EMBL), Heidelberg (Germany) Corso "WHAT IF course" (Dr. G. Vriend)

RICONOSCIMENTI E PREMI

2018	Ottiene un premio di produttività individuale nell'ambito del progetto NANOCROSS
Giugno 1998	Vincitrice del premio "Giovani Autori Scientifici" per un lavoro sperimentale innovativo dal titolo "Two-photon microscopy and spectroscopy on Antarctic fungus under enhanced UV-B irradiation"

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

VEDERE APPENDIX A : LISTA DELLE PUBBLICAZIONI

Corresponding author e/o prima autrice di 14 pubblicazioni peer-reviewed su riviste internazionali e co-autrice di altrettante pubblicazioni peer-reviewed su riviste internazionali. Prima autrice e co-autrice di 10 relazioni di natura tecnico-scientifica e di 3 pubblicazioni di natura divulgativa.

ATTIVITÀ DI VALUTAZIONE E REFERAGGIO

Dal 2008 ad oggi

Referee indipendente per riviste scientifiche internazionali peer-reviewed: Current Proteomics, Journal of Chemical Physics; Journal of Molecular Graphics and Modelling; Protein Science; BMC Biochemistry; Journal of Molecular Biology; Pant Cell Reports

Testimonial per la rivista: International Journal of Nanomedicine

ATTIVITÀ DI FORMAZIONE

AA 2010/2011

Tutor Tirocinio per Tesi Magistrale di Studenti Universitari

Correlatrice di tesi magistrale in Ingegneria Biomedica presso Campus Biomedico (Michelangelo Scordino, *Dinamica Molecolare di Strutture Proteiche: analisi funzionale e topologica*)

AA 2014/2015

Relatrice esterna di tesi magistrale in Fisica presso Università degli Studi di Roma Tor Vergata (Marco Polimeni, *Dynamics at the peptide-titania interface*)

AA 2019/2020

Correlatrice di tesi magistrale in Biotecnologie Industriali presso Università degli Studi di Milano Bicocca (Giorgia Innamorati, *Effect of phthalates and perfluoroalkyl substances on DNA methyltransferases activity: in-depth study of epigenetic alterations through in silico and in vitro approaches*)

AA 2019/2020

Relatrice esterna di tesi magistrale in Bioinformatica presso Università degli Studi di Roma Tor Vergata (Maurizio Salvatore Podda, *In silico characterization of the binding mechanism of the NRP-1, FABP3 and FABP7 tumor targets and specific blood-brain barrier crossing peptides conjugated with coat proteins of plant-derived nanoparticles: towards the development of a theranostic platform for brain tumor*)

AA 2019/2020

Relatrice esterna di tesi magistrale in Bioinformatica presso Università degli Studi di Roma Tor Vergata (Alessia Piergentili, *Crocus sativus L. e nutrieipigenomica: studi in silico di interazioni con le istone deacetilasi*)

AA 2020/in corso

Relatrice esterna di tesi magistrale in Bioinformatica presso Università degli Studi di Roma Tor Vergata (Roberto Pellegrini, *Simulazioni molecolari dell'interazione del virus SARS-CoV-2 con il particolato atmosferico*, titolo provvisorio)

AA 2020/in corso

Relatrice esterna di tesi magistrale in Bioinformatica presso Università degli Studi di Roma Tor Vergata (Davide Pietrafesa, *Studio dell'effetto della mutazione E326K sulla struttura e dinamica della proteina acido beta-glucosidasi*, titolo provvisorio)

Alternanza Scuola Lavoro (ASL) e Percorsi per le Competenze Trasversali e l'Orientamento (PCTO) per Licei

2018

Responsabile di due percorsi formativi dal titolo "Corso di Bioinformatica" nell'ambito di Alternanza Scuola Lavoro (ASL) rivolto agli studenti del Liceo Scientifico "Talete" di Roma (12-16 Febbraio) e del Liceo Scientifico "Morgagni" (16-20 Aprile)

2019

Responsabile di due percorsi formativi dal titolo "Corso di Bioinformatica" nell'ambito di Alternanza Scuola Lavoro (ASL) rivolto agli studenti del Liceo Scientifico "U. Midossi" di Civita Castellana (VT) (4-8 Febbraio) e del Liceo Scientifico "Talete" (11-15 Marzo)

Tutor di un percorso formativo dal titolo "Open Day 2019 ScienceEscape" rivolto a studenti del Liceo Scientifico Talete di Roma, nell'ambito delle attività di alternanza scuola-lavoro (ASL)

ATTIVITÀ DI DIVULGAZIONE SCIENTIFICA

Partecipazione ad Eventi e Realizzazione di Video divulgativi

- 2022 Partecipa al progetto Cittadinanza Organizzativa promosso dalla Presidenza del Consiglio dei Ministri con un seminario dal titolo "Le simulazioni di dinamica molecolare per valutare l'impatto dell'ambiente sulla salute umana e per lo sviluppo di nuovi approcci terapeutici"
<https://www.youtube.com/watch?v=YyXytwoABwl&t=3s>
- 2021 Lezione didattico-divulgative per gli studenti del Liceo Scientifico "Taletè" di Roma (12 Novembre)
- 2021 Nell'ambito del Progetto NET2, G.A. 101036127 -Lezione ed esercitazione pratica "Incontro ravvicinato con il virus SARS-CoV-2: il ruolo della modellistica molecolare nella lotta al Covid-19" per gli studenti del Liceo Scientifico "Ruffini" di Viterbo (23 Settembre) e del Liceo Scientifico "Midossi" di Nepi (1 Ottobre)
- 2021 Partecipazione al video Pillola #2 di SALLO! Quiz - Impatti e Costi del Cambiamento Climatico ideato da ENEA nell'ambito del Programma ALL4Climate lanciato dal Ministero per la Transizione Economica e da Connect4Climate (Banca Mondiale) per sensibilizzare i cittadini sul tema del cambiamento climatico
https://www.enea.it/it/seguici/events/sallo_01ott2021/PRECOP26
<https://www.youtube.com/watch?v=5I9tKO6BoNs>
- 2021 Partecipazione alla realizzazione di un video nell'ambito della iniziativa promossa dal CUG-ENEA "Donne nella Ricerca", <https://donne.enea.it/caterina-arcangeli-e-claudia-consales/>
- 2021 Nell'ambito del Progetto NET2, G.A. 101036127 - Realizzazione di un laboratorio per bambini e cittadini dal titolo "La genomica del clima presso Parco Talenti (9-10 Luglio) e Città dell'altra Economia (24-25 Settembre)
- 2015 – 2019 **Partecipazione a Notte della Ricerca e Open Day della Ricerca**
Partecipa attivamente alla realizzazione delle attività di comunicazione e divulgazione organizzando Laboratori per adulti e bambini (Cromosogno e DNAlandia) ed Escape Room scientifiche (Scienceescape)

CONGRESSI/CONVEGNI

Partecipazione Orali su invito

- 2016 Buonocore F. e **Arcangeli C.**, "Esperimenti in silico per studiare la struttura e la dinamica di sistemi biologici autoassemblanti e di interfacce bio-inorganiche" in Workshop, Costruire dispositivi con un nanoLEGO bio-inorganico presso C.R. ENEA Casaccia 26 Gennaio 2016
- 2015 **Arcangeli C.** "Structure-based design and simulation of biomolecules for nanobiotechnology applications" in CMAST Workshop: Computational Materials Science and Technology @ CRESCO, Sede Legale ENEA, Roma 13 Aprile 2015
- 2013 **Arcangeli C** and Buonocore F. "Application-oriented atomistic design of nanomaterials: key cases and examples" Design & Modeling at the Nano-scale. NANOFORUM 2013 , Facoltà di Ingegneria Civile e Industriale, Roma 20 settembre 2013
- 2010 **Arcangeli C.**, "Molecular Modeling and simulation of virus-like particles as vaccine carrier for heterologous antigens" in Workshop Modern Vaccines and Delivery Technologies, 14-15 Ottobre 2010, C.R. ENEA Casaccia, Roma (Italia)
- 2008 **Arcangeli C.** "Single-chain antibodies (scFv) and immunocjugates: computational and functional approaches". Ehrlich II 2nd World Convergence on Magic Bullets, 3-5 Ottobre 2008. Nurnverg (Germany)
- 1997 **Arcangeli C.** "MD simulation evidences of a temperature-dependent dynamical transition in Plastocyanin as triggered by the hydration water dynamics". First Joint Meeting of the Italian and German Biophysical Societies, 8-11 Maggio Hunfeld, Rhon (Germany)

Partecipazione in qualità di Chairman

- 2016 Chairman della Sessione II.E : Simulation and Modeling for Nanotechnology durante la Conferenza NANOINNOVATION. Chiostro di Sangallo della Facoltà di Ingegneria Civile e Industriale Roma 20-23 Settembre 2016

Organizzazione di Workshop

- 2015 Organizza (insieme ai colleghi M. Celino e F. Buonocore) il Workshop CMAST: Computational

COMPETENZE PERSONALI

LINGUA MADRE

ITALIANO

ALTRE LINGUE

INGLESE

- Comprensione
- Produzione Scritta
- Parlato

ASCOLTO/LETTURA B1/B2

C1/C2

INTERAZIONE/PRODUZIONE ORALE B1/B2

COMPETENZE COMUNICATIVE

Ottime capacità comunicative acquisite attraverso l'esperienza come scienziata, tutor degli studenti di tesi, relatrice in workshop, congressi, eventi di divulgazione per i cittadini nell'ambito della Notte Europea dei Ricercatori, OpenDay della Ricerca ENEA, video divulgativi etc.

COMPETENZE ORGANIZZATIVE E GESTIONALI

Ottime capacità organizzative e gestionali acquisite attraverso esperienze di coordinamento di progetti, organizzazione delle attività di laboratorio, di percorsi formativi per studenti nell'ambito di Alternanza Scuola Lavoro (ASL) e Percorsi per le Competenze Trasversali e l'Orientamento (PCTO) e tutoraggio degli studenti di tesi universitaria.

COMPETENZE TECNICO E SCIENTIFICHE

Informatica and Bioinformatica

– UNIX (nei dialetti Aix, Irix e MacOS X), Linux (CentOS, Ubuntu);

– Python, Perl, Bash (linguaggi di scripting);

– Fortran77 e C (linguaggi di programmazione);

– Codici di Dinamica Molecolare Simulata (Gromacs, NAMD);

– Grafica Molecolare (WHAT-IF, VMD, InsightII, Quanta, Rasmol, Molscript, Pymol, Chimera);

– Strumenti di Bioinformatica per le sequenze genomiche e proteiche (BLAST, FASTA, ClustalW)

Modelling Molecolare (Modeller, WAM-Web Antibody Modeling, What-IF, Rosetta, SwissModel, I-Tasser)

– Strumenti di docking molecolare (Autodock, HADDOCK, ClusPro, Z-dock)

– Applicativi di scrittura (LateX, Libre Office, Microsoft Office), di analisi di immagini (Adobe Photoshop, Sodipodi, Gimp), e di analisi di dati (XMGRACE, gnuplot, Origin);

Spettroscopia e Microscopia

– Spettroscopia di Fluorescenza e Microscopia Raman

– Miscoscopia di Fluorescenza (Two-photon e Confocale)

– Tecniche FRAP (Fluorescence Recovery After Photobleaching) e FRET (Fluorescence Resonance Energy Transfer).

COMPETENZE ARTISTICHE

Allieva scuola di recitazione teatrale presso Omnes Artes (Direttori artistici: Veruska Rossi e Guido Governale) con la collaborazione di Ignazio Raso (2012-2020)

Co-fondatrice e attrice della compagnia teatrale "I nove di quari" con la collaborazione di Clara Sancricca e Gianluca Musiu (dal 2021)

PATENTE DI GUIDA

Patente B

ALLEGATI

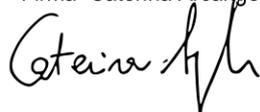
Appendix A: Lista delle Pubblicazioni Scientifiche

DATI PERSONALI

Autorizzo il trattamento dei miei dati personali ai sensi del Dlgs 196 del 30 giugno 2003 e dell'art. 13 GDPR (Regolamento UE 2016/679).

Roma, 17.03.2022

Firma Caterina Arcangeli



Pubblicazioni peer-reviewed su riviste internazionali

- Innamorati, G., Pierdomenico M, Benassi B, **Arcangeli C***. The interaction of DNMT1 and DNMT3A epigenetic enzymes with phthalates and perfluoroalkyl substances: an *in silico* approach. J Biomol Struct Dyn. 2022 Jan 6:1-17. <https://doi.org/10.1080/07391102.2021.2023642>. Epub ahead of print. PMID: 34986741.
- Lico, C., Tanno, B., Marchetti, L., Novelli, F., Giardullo, P., **Arcangeli, C.**, Pazzaglia, S., Podda, M.S., Santi, L., Bernini, R., Baschieri, S., Mancuso, M., 2021. Tomato Bushy Stunt Virus Nanoparticles as a Platform for Drug Delivery to Shh-Dependent Medulloblastoma. Int. J. Mol. Sci. 22(19), 10523. <https://doi.org/10.3390/ijms221910523>
- **Arcangeli, C.*^**, Lico, C., Baschieri, S., Mancuso, M., 2019b. Characterization Of Blood–Brain Barrier Crossing And Tumor Homing Peptides By Molecular Dynamics Simulations. International Journal of Nanomedicine 14, 10123–10136. <https://doi.org/10.2147/IJN.S225793>
- Polimeni, M., Petridis, L., Smith, J.C., **Arcangeli, C.***, 2017b. Dynamics at a Peptide-TiO2 Anatase (101) Interface. J Phys Chem B 121, 8869–8877. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b04707>
- Buonocore, F., **Arcangeli, C.**, Gala, F., Zollo, G., Celino, M., 2015. Adsorption of Modified Arg, Lys, Asp, and Gln to Dry and Hydrated ZnO Surface: A Density Functional Theory Study. J Phys Chem B 119, 11791–11797. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b05584>
- Agosta, L., Zollo, G., **Arcangeli, C.**, Buonocore, F., Gala, F., Celino, M., 2015a. Water driven adsorption of amino acids on the (101) anatase TiO₂ surface: an ab initio study. Phys Chem Chem Phys 17, 1556–1561. <https://doi.org/10.1039/c4cp03056g>
- **Arcangeli, C.*^**, Circelli, P., Donini, M., Aljabali, A.A.A., Benvenuto, E., Lomonosoff, G.P., Marusic, C., 2014. Structure-based design and experimental engineering of a plant virus nanoparticle for the presentation of immunogenic epitopes and as a drug carrier. J. Biomol. Struct. Dyn. 32, 630–647. <https://doi.org/10.1080/07391102.2013.785920>
- Latini, A., Sperandei, M., Cantale, C., **Arcangeli, C.**, Ammar, K., Galeffi, P., 2013. Variability and expression profile of the DRF1 gene in four cultivars of durum wheat and one triticale under moderate water stress conditions. Planta 237, 967–978. <https://doi.org/10.1007/s00425-012-1816-6>
- **Arcangeli, C.*^**, Borriello, I., Gianese, G., Celino, M., Morales, P., 2013. Organic Functionalization of Metal Oxide Surfaces: An Atomic Scale Modeling Approach. Nanosci Nanotechnol Lett 5, 1147–1154. <https://doi.org/10.1166/nnl.2013.1692>
- Lombardi, A., Gianese, G., **Arcangeli, C.**, Galeffi, P., Sperandei, M., 2011. Bacterial cytoplasm production of an EGFP-labeled single-chain Fv antibody specific for the HER2 human receptor. J. Biomol. Struct. Dyn. 29, 425–439. <https://doi.org/10.1080/07391102.2011.10507396>
- **Arcangeli, C.*^**, Cantale, C., Galeffi, P., Rosato, V., 2008. Structure and dynamics of the anti-AMCV scFv(F8): effects of selected mutations on the antigen combining site. J. Struct. Biol. 164, 119–133. <https://doi.org/10.1016/j.jsb.2008.06.013>
- **Arcangeli, C.*^**, Cantale, C., Galeffi, P., Gianese, G., Paparcone, R., Rosato, V., 2008. Understanding structural/functional properties of immunoconjugates for cancer therapy by computational approaches. J. Biomol. Struct. Dyn. 26, 35–48. <https://doi.org/10.1080/07391102.2008.10507221>
- Bizzarri, R., **Arcangeli, C.**, Arosio, D., Ricci, F., Faraci, P., Cardarelli, F., Beltram, F., 2006. Development of a novel GFP-based ratiometric excitation and emission pH indicator for intracellular studies. Biophys. J. 90, 3300–3314. <https://doi.org/10.1529/biophysj.105.074708>
- Lidonnici, M.R., Rossi, R., Paixão, S., Mendoza-Maldonado, R., Paolinelli, R., **Arcangeli, C.**, Giacca, M., Biamonti, G., Montecucco, A., 2004. Subnuclear distribution of the largest subunit of the human origin recognition complex during the cell cycle. J. Cell. Sci. 117, 5221–5231. <https://doi.org/10.1242/jcs.01405>
- Bizzarri, R., Pellegrini, V., **Arcangeli, C.**, Ferrari, A., Nifosi, R., Pingue, P., Tozzini, V., Giacca, M., Beltram, F., 2004. Engineered Green Fluorescence Proteins for Proteomics and Biomolecular Electronic Applications. Macromol. Symp. 218, 283–292. <https://doi.org/10.1002/masy.200451429>
- Nifosi, R., Ferrari, A., **Arcangeli, C.**, Tozzini, V., Pellegrini, V., Beltram, F., 2003. Photoreversible Dark State in a Tristable Green Fluorescent Protein Variant. J. Phys. Chem. B

107, 1679–1684. <https://doi.org/10.1021/jp0266852>

- Fittipaldi, A., Ferrari, A., Zoppé, M., **Arcangeli, C.**, Pellegrini, V., Beltram, F., Giacca, M., 2003. Cell membrane lipid rafts mediate caveolar endocytosis of HIV-1 Tat fusion proteins. *J. Biol. Chem.* 278, 34141–34149. <https://doi.org/10.1074/jbc.M303045200>
- Ferrari, A., Pellegrini, V., **Arcangeli, C.**, Fittipaldi, A., Giacca, M., Beltram, F., 2003. Caveolae-mediated internalization of extracellular HIV-1 tat fusion proteins visualized in real time. *Mol. Ther.* 8, 284–294.
- Bizzarri, A.R., Paciaroni, A., **Arcangeli, C.**, Cannistraro, S., 2001. Low-frequency vibrational modes in proteins: a neutron scattering investigation. *Eur. Biophys. J.* 30, 443–449.
- **Arcangeli, C.[^]**, Bizzarri, A.R., Cannistraro, S., 2001. Molecular dynamics simulation and essential dynamics study of mutated plastocyanin: structural, dynamical and functional effects of a disulfide bridge insertion at the protein surface. *Biophys. Chem.* 92, 183–199.
- **Arcangeli, C.[^]**, Bizzarri, A.R., Cannistraro, S., 2001. Concerted motions in copper plastocyanin and azurin: an essential dynamics study. *Biophys. Chem.* 90, 45–56.
- **Arcangeli, C.[^]**, Yu, W., Cannistraro, S., Gratton, E., 2000. Two-photon autofluorescence microscopy and spectroscopy of Antarctic fungus: new approach for studying effects of UV-B irradiation. *Biopolymers* 57, 218–225. [https://doi.org/10.1002/1097-0282\(2000\)57:4<218::AID-BIP3>3.0.CO;2-G](https://doi.org/10.1002/1097-0282(2000)57:4<218::AID-BIP3>3.0.CO;2-G)
- **Arcangeli, C.[^]**, Cannistraro, S., 2000. In situ Raman microspectroscopic identification and localization of carotenoids: approach to monitoring of UV-B irradiation stress on Antarctic fungus. *Biopolymers* 57, 179–186. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0282\(2000\)57:3<179::AID-BIP6>3.0.CO;2-4](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0282(2000)57:3<179::AID-BIP6>3.0.CO;2-4)
- Paciaroni, A., Stroppolo, M.E., **Arcangeli, C.**, Bizzarri, A.R., Desideri, A., Cannistraro, S., 1999. Incoherent neutron scattering of copper azurin: a comparison with molecular dynamics simulation results. *Eur. Biophys. J.* 28, 447–456.
- Guzzi, R., **Arcangeli, C.**, Bizzarri, A.R., 1999. A molecular dynamics simulation study of the solvent isotope effect on copper plastocyanin. *Biophys. Chem.* 82, 9–22.
- **Arcangeli, C.[^]**, Bizzarri, A.R., Cannistraro, S., 1999. Long-term molecular dynamics simulation of copper azurin: structure, dynamics and functionality. *Biophys. Chem.* 78, 247–257.
- **Arcangeli, C.[^]**, Bizzarri, A.R., Cannistraro, S., 1998. Role of interfacial water in the molecular dynamics-simulated dynamical transition of plastocyanin. *Chemical Physics Letters* 291, 7–14. [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(98\)00557-0](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(98)00557-0)
- **Arcangeli, C.[^]**, Zuconi, L., Onofri, S., Cannistraro, S., 1997. Fluorescence study on whole Antarctic fungal spores under enhanced UV irradiation. *Journal of photochemistry and photobiology B: Biology* 39, 258–264.

Publicazioni di natura divulgativa

- **Arcangeli, C.[^]**, Patrono, C., Testa, A., 2021. In missione con i supereroi per salvare il pianeta, *Energia, ambiente e innovazione* 59-62 <https://doi.org/10.12910/EAI2021-046>
- Barone, F., De Angelis, I., Andreoli, C., Battistelli, C.L., **Arcangeli, C.**, Leter, G., 2017. Metodi in vitro e in silico per la valutazione del potenziale tossicologico dei nanomateriali. *Energia, Ambiente e Innovazione* 32–37. <https://doi.org/10.12910/EAI2017-045>
- **Arcangeli, C.[^]**, Brunori, C., Celino, M., Pacchierotti, F., della Sala, D., 2012b. Approaching the responsible use of nanotechnologies. The global trends. *EAI: Energia, Ambiente e Innovazione*, bimestrale dell'ENEA gennaio-febbraio 2012, 66–78.

Report di natura tecnico-Scientifica

- Podda M.S., Lico C, Baschieri S., Mancuso M., **Arcangeli C.***. 2021. Dynamics of interaction of tumor homing peptides and their receptors by molecular dynamics simulations, in “High Performance Computing on CRESCO Infrastructure: Research Activities and Results 2020” p.58. ISBN:978-88-8286-429-3.
- Piergentili A., Benassi B, **Arcangeli C.***. 2021. *Crocus sativus L* and nutriepigenomics: *in silico* studies of interaction with histone deacetylases, in “High Performance Computing on CRESCO Infrastructure: Research Activities and Results 2020” p.85. ISBN:978-88-8286-429-3.
- Innamorati G., Pierdomenico M., Benassi B, **Arcangeli C.***. 2021. Molecular dynamics simulations to evaluate the effects of environmental pollutants on epigenetic modulators, in “High Performance Computing on CRESCO Infrastructure: Research Activities and Results 2020” p.75. ISBN:978-88-8286-429-3.
- **Arcangeli, C.***, Lico, C., Baschieri, S., Mancuso, M., 2019. Molecular Dynamics Simulations of Peptides for Brain Theranostic Nanosystems, in: “High Performance Computing on CRESCO

- Infrastructure: Research Activities and Results 2018." p. 155. ISBN: 978-88-8286-390-6
- Polimeni, M., Petridis, L., Smith, J.C., **Arcangeli, C.***, 2017. Molecular Dynamics Simulations of peptide-TiO₂ interfaces, in: "High Performance Computing on CRESCO Infrastructure: Research Activities and Results 2016." p. 211. ISBN 978-88-8286-362-3
 - Buonocore, F., **Arcangeli, C.**, Celino, M., Gala, F., Zollo, G., 2016. First-principles investigation of the amino acids adsorption to hydrated non-polar ZnO surface, in: "High Performance Computing on CRESCO Infrastructure: Research Activities and Results 2015." p. 68. ISBN 978-88-8286-325-8
 - Agosta, L., Zollo, G., **Arcangeli, C.**, Buonocore, F., Gala, F., Celino, M., 2015b. Arg and Lys selective adsorption on (101) TiO₂ anatase surface in water solution, in: "High Performance Computing on CRESCO Infrastructure: Research Activities and Results 2014." p. 173. ISBN 978-88-8286-312-8
 - Agosta, L., **Arcangeli, C.**, Buonocore, F., Celino, M., Gala, F., Zollo, G., 2014. Simulation of the adsorption mechanism of titanium-binding peptide to TiO₂ anatase surface., in: High Performance Computing on CRESCO Infrastructure: Research Activities and Results 2013. p. 61. ISBN 978-88-8286-312-8.
 - **Arcangeli, C.***, Celino, M., 2013. Peptide-TiO₂ Surface Interaction in Solution by Molecular Dynamics Simulation, in: "High Performance Computing on CRESCO Infrastructure: Research Activities and Results 2012." p. 9. ISBN 978-88-8286-302-9.
 - **Arcangeli, C.***, Borriello, I., Celino, M., 2012. Organic functionalization of metal oxide surfaces: numerical simulations of peptides adsorption onto titania surface using QUANTUM-ESPRESSO and GROMACS codes on CRESCO HPC, in: "High Performance Computing on CRESCO Infrastructure: Research Activity and Results 2010-2011." p. 171. ISBN 978-88-8286-312-8

DATI PERSONALI

Autorizzo il trattamento dei miei dati personali ai sensi del Dlgs 196 del 30 giugno 2003 e dell'art. 13 GDPR (Regolamento UE 2016/679).

Roma, 17.03.2022

Firma Caterina Arcangeli

