

**Allegato alla domanda di partecipazione**  
**Curriculum formativo, didattico, scientifico e professionale del candidato**

**Dichiarazione sostitutiva di certificazioni**

(Art. 46, D.P.R. 28 dicembre 2000 n. 445)

**Dichiarazione sostitutiva dell'atto di notorietà**

(da sottoscrivere davanti all'impiegato addetto o da presentare o spedire con la fotocopia di un documento di identità)

(Art. 47, D.P.R. 28 dicembre 2000 n. 445)

Estremi del bando di selezione	Area: 02 - Scienze fisiche S.C.: 02/D1 - Fisica applicata, didattica e storia della fisica SSD: FIS/07 Responsabile Scientifico: Paolo Ruggerone Titolo del Progetto: Studio computazionale dell'interazione di composti antimicrobici con sistemi di efflusso batterici
Informazioni aggiornate al	23/03/2021
Nome e Cognome	Andrea Catte
Data di nascita	22/10/1972

**Esperienza professionale**

<b>Periodo</b>	<b>Ente</b>	<b>Principali attività e responsabilità</b>
<b>16/12/2019 – 15/12/2020</b>	Scuola Normale Superiore di Pisa, Pisa, Toscana, Italia	Realizzazione di: (1) calcoli quantomeccanici (QM) di molecole interagenti con il recettore adrenergico beta 2 ( $\beta_2$ AR), (2) molecular docking runs dei ligandi esogeni studiati con i calcoli QM e di ligandi endogeni noti e (3) simulazioni di dinamica molecolare atomistiche di complessi del $\beta_2$ AR con i vari ligandi studiati attraverso i calcoli QM e di molecular docking inseriti in membrane fosfolipidiche idratate in assenza e in presenza di colesterolo. Scrittura di articoli per pubblicazioni scientifiche. Preparazione di presentazioni orali e poster per meetings interni, nazionali ed internazionali. Attività di ricerca svolta come assegnista di ricerca sotto la supervisione del Prof. Vincenzo Barone.
<b>03/07/2017 – 02/07/2019</b>	Scuola Normale Superiore di Pisa, Pisa, Toscana, Italia	Realizzazione di simulazioni di dinamica molecolare atomistiche del canale proteico transmembrana di ioni potassio attivato dal voltaggio (voltage-gated potassium channel) Kv4.3 in forma nativa (wild-type) e mutato inserito in membrane fosfolipidiche idratate in condizioni di forza ionica fisiologica sottoposte ad un potenziale di membrana non fisiologico. Scrittura di articoli per pubblicazioni scientifiche. Preparazione di presentazioni orali e poster per meetings interni, nazionali ed internazionali. Scrittura di progetti di ricerca per richieste di finanziamenti nazionali ed internazionali. Preparazione

		delle pagine web per il sito del gruppo di ricerca del Prof. Brancato. Attività di ricerca svolta come assegnista di ricerca sotto la supervisione del Prof. Giuseppe Brancato.
<b>08/01/2014 – 30/06/2017</b>	University of East Anglia, Norwich, Norfolk, Regno Unito	Realizzazione di simulazioni di dinamica molecolare atomistiche e coarse grained di membrane lipidiche con diversa composizione chimica in assenza e in presenza di EPR spin probes, molecole gassose, peptidi antimicrobici e proteine transmembrana. Scrittura di articoli per pubblicazioni scientifiche. Preparazione di presentazioni orali e poster per meetings interni, nazionali ed internazionali. Preparazione di immagini per la pagina web del Norwich Research Park e per una pubblicazione del Prof. Vasily Oganessian. Supervisione di laureandi e dottorandi. Attività di ricerca svolta come senior postdoctoral researcher sotto la supervisione del Prof. Vasily Oganessian.
<b>05/01/2009 – 31/07/2013</b>	University of Alabama at Birmingham, Birmingham, Alabama, Stati Uniti d'America	Realizzazione di simulazioni di dinamica molecolare atomistiche e coarse grained di particelle di High Density Lipoproteins (HDL) di diversa morfologia e di membrane e vescicole lipidiche con diversa composizione chimica in assenza e in presenza di diverse apolipoproteine e di peptidi mimetici dell'apolipoproteina A-I (apoA-I). Scrittura di articoli per pubblicazioni scientifiche. Preparazione di presentazioni orali e poster per meetings interni, nazionali ed internazionali. Supervisione di laureandi. Attività di ricerca svolta come Postdoctoral Research Scholar (fino al 31/08/2010) e Research Associate (dal 01/09/2010) sotto la supervisione del Prof. Dr. Jere P. Segrest.
<b>05/01/2007 – 31/12/2008</b>	Tampere University of Technology, Tampere, Finlandia	Realizzazione di simulazioni di dinamica molecolare atomistiche e coarse grained di particelle di High Density Lipoproteins (HDL) sferoidali di varia composizione lipidica in presenza dell'apolipoproteina A-I (apoA-I). Scrittura di articoli per pubblicazioni scientifiche. Preparazione di presentazioni orali e poster per meetings interni, nazionali ed internazionali. Attività di ricerca svolta come Postdoctoral Research Scholar sotto la supervisione dei Professori Mikko Karttunen e Ilpo Vattulainen.

<b>10/05/2004 – 30/11/2006</b>	University of Alabama at Birmingham, Birmingham, Alabama, Stati Uniti d'America	Realizzazione di simulazioni di dinamica molecolare atomistiche e coarse grained di particelle di High Density Lipoproteins (HDL) di diversa morfologia con diversa composizione chimica in presenza dell'apolipoproteina A-I (apoA-I). Scrittura di articoli per pubblicazioni scientifiche. Preparazione di presentazioni orali e poster per meetings interni, nazionali ed internazionali. Attività di ricerca svolta come Postdoctoral Research Scholar (fino al 31/01/2006) e Research Associate (dal 01/02/2006) sotto la supervisione del Prof. Dr. Jere P. Segrest.
<b>05/2000 05/2001</b>	Università degli Studi di Cagliari, Cagliari, Sardegna, Italia	Tutor per il Salone dello Studente 2000 e 2001 per il Corso di Laurea in Chimica della Facoltà di Scienze dell'Università di Cagliari (112 ore).
<b>01/02/2001 – 30/04/2001</b>	Università degli Studi di Cagliari, Cagliari, Sardegna, Italia	Tutor di Chimica Organica, corso tenuto dalla Prof. ssa Stefana Melis e dal Prof. Guido Alberti del Corso di Laurea in Biologia della Facoltà di Scienze dell'Università di Cagliari (48 ore).

#### Istruzione, formazione (es. titoli di studio, certificazioni professionali/linguistiche/informatiche)

<b>Data</b>	<b>Titolo / Principali tematiche</b>	<b>Ente</b>
<b>05/01/2017 – 30/04/2017</b>	Partecipazione all'i-Teams Programme 2017 sponsorizzato dall'University of East Anglia e dal Norwich Research Park / sviluppo di strategie di commercializzazione per un prodotto nanotecnologico sotto la supervisione di un manager industriale	University of East Anglia, Norwich, Norfolk, Regno Unito
<b>01/09/2014 – 31/03/2015</b>	Corso intitolato Developing Teaching Skills for Postgraduate Students frequentato e completato presso il Centre for Staff & Educational Development dell'University of East Anglia / sviluppo degli skills richiesti per l'insegnamento	University of East Anglia, Norwich, Norfolk, Regno Unito
<b>01/09/2007 – 31/12/2007</b>	Corso di Finlandese per principianti 1 (78 ore)	Tampere University of Technology, Tampere, Finlandia
<b>19/12/2003 / 01/10/2000 – 31/10/2003</b>	Dottorato di ricerca in Chimica / conseguito con una tesi intitolata: Studio NMR Multinucleare dell'Interazione di Fasi Liquido Cristalline di Na-DNA con Intercalanti e Ioni Metallici Divalenti. Attività di ricerca svolta come dottorando nel gruppo NMR del Dipartimento di Chimica sotto la supervisione del Prof.	Università degli Studi di Cagliari, Cagliari, Sardegna, Italia

	Adolfo Lai	
<b>01/03/2003 – 05/03/2003</b>	Corso di Inglese livello 2 (40 ore)	Universita' di Leiden, Leiden, Paesi Bassi
<b>01/10/2002 – 31/12/2002</b>	Corso di Olandese per principianti (37.5 ore)	“Volksuniversiteit” di Leiden, Leiden, Paesi Bassi
<b>2001 - 2003</b>	Corsi di Inglese livelli Pre-Intermedio II e Intermedio I (56 ore ciascuno)	Universita' degli Studi di Cagliari, Cagliari, Sardegna, Italia
<b>01/07/2002 – 31/07/2003</b>	Marie Curie Fellowship Grant / attivita' di ricerca sui cristalli liquidi di DNA svolta come dottorando nel gruppo CBAC dell'Istituto di Chimica di Leiden sotto la supervisione del Prof. Jan Reedijk	Universita' di Leiden, Leiden, Paesi Bassi
<b>09/2000</b>	Esame di stato / votazione: 90/100	Universita' degli Studi di Cagliari, Cagliari, Sardegna, Italia
<b>14/07/2000</b> <b>01/09/1991</b> <b>14/07/2000</b>	Laurea in Chimica / conseguita con una tesi intitolata: Studio NMR Multinucleare di Soluzioni Acquose Isotrope e Anisotrope di Na-DNA in assenza e in presenza di Bromuro di Etidio. Attivita' di ricerca svolta come laureando nel gruppo NMR del Dipartimento di Chimica sotto la supervisione dei Professori Mariano Casu e Adolfo Lai / votazione: 110/110 cum laude	Universita' degli Studi di Cagliari, Cagliari, Sardegna, Italia
<b>01/09/1995 – 31/03/1996</b>	Corsi di Inglese livello Elementare II (50 ore)	Universita' degli Studi di Cagliari, Cagliari, Sardegna, Italia
<b>13/07/1991</b> <b>01/09/1986 – 13/07/1991</b>	Diploma di Maturita' Scientifica / materie portate all'esame: Italiano e Inglese / votazione: 54/60	Liceo Scientifico "G. Brotzu" di Quartu Sant'Elena, Cagliari, Sardegna, Italia

### **Publicazioni / Convegni**

1. “In silico investigation of the interaction between the voltage-gated potassium channel Kv4.3 and its auxiliary protein KChIP1”, Andrea Catte, Letizia Ferbel, Nicholas Bhattacharjee, Muhammad Jan Akhunzada, Tommaso D'Agostino, and Giuseppe Brancato, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 21, 25290-25301, (2019), doi: 10.1039/c9cp04082j.
2. “Temperature Dependence of the Structure and Dynamics of a Dye-Labeled Lipid in a Planar Phospholipid Bilayer: A Computational Study”, Muhammad Jan Akhunzada, Luca Sagresti, Andrea Catte, Nicholas Bhattacharjee, Tommaso D'Agostino, and Giuseppe Brancato, *J. Membrane Biol.* 1-14, (2019), doi: 10.1007/s00232-019-00081-6.
3. “Interplay between lipid lateral diffusion, dye concentration and membrane permeability unveiled by a combined spectroscopic and computational study of a model lipid bilayer”, Muhammad Jan Akhunzada, Francesca D'Autilia, Balasubramanian Chandramouli, Nicholas Bhattacharjee, Andrea Catte, Roberto Di Rienzo, Francesco Cardarelli, and Giuseppe Brancato, *Sci. Rep.* 9 (1508), 1-12, (2019), doi: 10.1038/s41598-018-37814-x.
4. “Direct prediction of EPR spectra from lipid bilayers - a route to understanding structure and dynamics in biological membranes”, Andrea Catte, Gaye F. White, Mark R. Wilson, and Vasily S. Oganessian, *Chem. Phys. Chem.*, 19, 1-12, (2018), doi:10.1002/cphc.201800386.

5. "Antimicrobial action of the cationic peptide, chrysopsin-3: a coarse-grained molecular dynamics study", Andrea Catte, Mark R. Wilson, Martin Walker, and Vasily S. Oganessian, *Soft Matter* 14, 2796-2807, (2018), doi: 10.1039/C7SM02152F.
6. "Molecular electrometer and binding of cations to phospholipid bilayers", Andrea Catte, Mykhailo Grych, Matti Javanainen, Claire Loison, Josef Melcr, Markus S. Miettinen, Luca Monticelli, Jukka Määttä, Vasily S. Oganessian, Samuli Ollila, Joonas Tynkkynen, and Sergey Vilov, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 18, 32560-32569, (2016), doi: 10.1039/C6CP04883H.
7. "Application of molecular modelling and EPR spectroscopy to lipid membranes - a combined approach", Andrea Catte, and Vasily S. Oganessian, *Armenian J. Phys.* 9 (2), 159-166, (2016).
8. "Towards atomistic resolution of phosphatidylcholine glycerol backbone and choline head group at different ambient conditions", Alexandru Botan, Andrea Catte, Fernando Favela, Patrick Fuchs, Matti Javanainen, Waldemar Kulig, Antti Lamberg, Markus S. Miettinen, Luca Monticelli, Jukka Määttä, Vasily S. Oganessian, O. H. Samuli Ollila, Marius Retegan, Hubert Santuz, and Joonas Tynkkynen, *arXiv.org* (2015), 1-20, arXiv:1309.2131v2.
9. "Surface Density-Induced Pleating of a Lipid Monolayer Drives Nascent High-Density Lipoprotein Assembly", Jere P. Segrest, Martin K. Jones, Andrea Catte, Medha Manchekar, Geeta Datta, Lei Zhang, Robin Zhang, Ling Li, James C. Patterson, Mayakonda N. Palgunachari, Jack F. Oram, and Gang Ren, *Structure* 23 (7), 1214-1226, (2015).
10. "A robust all-atom model for LCAT generated by homology modeling", Jere P. Segrest, Martin K. Jones, Andrea Catte, and Saravana Prakash Thirumuruganandham, *J. Lipid Res.* 56 (3), 620-634, (2015).
11. "MD simulations suggest important surface differences between reconstituted and circulating spherical HDL", Jere P. Segrest, Martin K. Jones, and Andrea Catte, *J. Lipid Res.* 54 (10), 2718-2732, (2013).
12. "Validation of previous computer models and MD simulations of discoidal HDL by a recent crystal structure of apoA-I", Jere P. Segrest, Martin K. Jones, Andrea Catte, and Saravana Prakash Thirumuruganandham, *J. Lipid Res.* 53, 1851-1863, (2012).
13. "'Sticky" and "Promiscuous"-the Yin and Yang of Apolipoprotein A-I Termini in Discoidal High Density Lipoproteins: A Combined Computational-Experimental Approach", Martin K. Jones, Feifei Gu, Andrea Catte, Ling Li, and Jere P. Segrest, *Biochemistry* 50, 2249-2263, (2011).
14. "Assessment of the Validity of the Double Super Helix Model for Reconstituted High Density Lipoproteins: A combined computational-experimental approach", Martin K. Jones, Lei Zhang, Andrea Catte, Ling Li, Michael Oda, Gang Ren, and Jere P. Segrest, *J. Biol. Chem.* 285, 41161-41171, (2010).
15. "Role of Lipids in Spheroidal High Density Lipoproteins", Timo Vuorela, Andrea Catte, Perttu S. Niemelä, Anette Hall, Marja T. Hyvönen, Siewert Jan Marrink, Mikko Karttunen, and Ilpo Vattulainen, *PLoS Comput. Biol.*, 6, (10), 1-14, (2010), doi: 10.1371/journal.pcbi.1000964.
16. "Structures of discoidal high density lipoproteins: A combined computational-experimental approach", Feifei Gu, Martin K. Jones, Jianguo Chen, James C. Patterson, Andrea Catte, W. Gray Jerome, Ling Li and Jere P. Segrest, *J. Biol. Chem.*, 285, 4652-4665, (2010).
17. "Dynamics of Activation of Lecithin:Cholesterol Acyltransferase by Apolipoprotein A-I", Martin K. Jones, Andrea Catte, Ling Li and Jere P. Segrest, *Biochemistry*, 48, 11196-11210, (2009).
18. "Thermal Stability of Apolipoprotein A-I in High Density Lipoproteins by Molecular Dynamics", Martin K. Jones, Andrea Catte, James C. Patterson, Feifei Gu, Jianguo Chen, Ling Li and Jere P. Segrest, *Biophys. J.*, 96, 354-371, (2009).
19. "Structure of spheroidal HDL particles revealed by combined atomistic and coarse grained simulations", Andrea Catte, James C. Patterson, Denys Bashtovyy, Martin K. Jones, Feifei Gu, Ling Li, Aldo Rampioni, Durba Sengupta, Timo Vuorela, Perttu S. Niemelä, Mikko Karttunen, Siewert Jan Marrink, Ilpo Vattulainen and Jere P. Segrest, *Biophys. J.*, 94, 2306-2319, (2008).
20. "Novel Changes in Discoidal High Density Lipoprotein Morphology: A Molecular Dynamics

Study”, Andrea Catte, James C. Patterson, Martin K. Jones, W. Gray Jerome, Denys Bashtovyy, Zhengchang Su, Feifei Gu, Jianguo Chen, Marcela P. Aliste, Stephen C. Harvey, Ling Li, Gilbert Weinstein and Jere P. Segrest, *Biophys. J.*, 90, 4345-4360, (2006).

**21.** “Binding of the Divalent Metal Ions  $Mg^{2+}$ ,  $Cd^{2+}$  and  $Ni^{2+}$  to Liquid Crystalline NaDNA: Polarized Light Microscopy and NMR Investigations”, Andrea Catte, Flaminia Cesare Marincola, Johan R.C. van der Maarel, Giuseppe Saba and Adolfo Lai, *Biomacromolecules*, 5, 1552-1556, (2004).

**22.** “Multinuclear NMR investigation of the NaDNA/Ethidium Bromide Anisotropic System”, Andrea Catte, Flaminia Cesare Marincola, Mariano Casu, Giuseppe Saba and Adolfo Lai, *J. Biomol. Struct. and Dyn.*, 20, (1), 99-106, (2002)

**1.** Analysis of L-DOPA and Droxidopa binding to Human Beta 2-Adrenergic Receptor, Andrea Catte, Akash Deep Biswas, Sara Del Galdo, Giordano Mancini and Vincenzo Barone, 65th Biophysical Society Virtual Annual Meeting - February 22-26, 2021, (poster).

**2.** Modeling inherited and de novo mutations in a voltage-gated potassium channel, Andrea Catte and Giuseppe Brancato, Meeting INFN BIOPHYS and PLEXNET 2018 - September 10-12, 2018, Castello Aldobrandesco, Arcidosso, Grosseto, Tuscany, Italy, EU.

**3.** Unravelling the molecular basis of Kv4.3 channelopathies: A molecular modeling study of the loss-of-function mutations causing spinocerebellar ataxia type 19/22, Andrea Catte, Nicholas Bhattacharjee, Muhammad Jan Akhunzada, Dineke S. Verbeek, Armagan Kocer, and Giuseppe Brancato, Dutch Neuroscience Meeting 2018 - June 7, 2018, Lunteren & First Scientific Dutch Ataxia Symposium - June 8, 2018, Groningen, The Netherlands, EU (poster).

**4.** Modeling inherited and de novo mutations in a voltage-gated potassium channel, Andrea Catte, Nicholas Bhattacharjee, Muhammad Jan Akhunzada, Dineke S. Verbeek, Armagan Kocer, and Giuseppe Brancato, Physiological role of ions in the brain: towards a comprehensive view by molecular simulation - CECAM workshop - May 21-23, 2018, Scuola Normale Superiore, Pisa, Tuscany, Italy, EU.

**5.** Predicting the effects of a de novo mutation in the Kv4.3 potassium channel, Muhammad Jan Akhunzada, Andrea Catte, Nicholas Bhattacharjee, Dineke S. Verbeek, Armagan Kocer, and Giuseppe Brancato, Physiological role of ions in the brain: towards a comprehensive view by molecular simulation - CECAM workshop - May 21-23, 2018, Scuola Normale Superiore, Pisa, Tuscany, Italy, EU (poster).

**6.** Modeling of artificial and natural ion channels, Andrea Catte, Nicholas Bhattacharjee, Muhammad Jan Akhunzada, Dineke S. Verbeek, Armagan Kocer, and Giuseppe Brancato, Theoretical Physics Tools and Complex Network Physics applied to Biology and Social Systems - Incontro Nazionale delle Iniziative INFN di Gruppo IV: BIOPHYS e PLEXNET - September 25-26, 2017, Scuola Normale Superiore, Pisa, Tuscany, Italy, EU.

**7.** Multiscale Molecular Dynamics Simulations of Antimicrobial Peptides Chrysopsin-3 in Lipid Bilayers and Vesicles, Andrea Catte, and Vasily S. Oganessian, 52nd Annual School of Chemistry Research Colloquium - September 22, 2016, School of Chemistry, University of East Anglia, Norwich, UK, EU.

**8.** Multiscale Molecular Dynamics Simulations of Antimicrobial Peptides Chrysopsin-3 in Lipid Bilayers, Andrea Catte, and Vasily S. Oganessian, Liposomes, Exosomes, and Virosomes: From Modeling Complex Membrane Processes to Medical Diagnostics and Drug Delivery – Biophysical Society Thematic Meeting - September 11-16, 2016, Ascona, Switzerland (poster).

**9.** Application of EPR spectroscopy and Molecular Dynamics simulations to lipid membranes – a combined approach, Andrea Catte, Christopher Prior, Gaye F. White, Mark R. Wilson, and Vasily S. Oganessian, 51st Annual School of Chemistry Research Colloquium - September 16, 2015, School of Chemistry, University of East Anglia, Norwich, UK, EU (poster).

**10.** All Atom Molecular Dynamics simulations of DPPC lipid bilayers in the presence of Oxygen and doped with Nitroxide Paramagnetic Spin Probes, Andrea Catte, Christopher Prior, Fatima Chami, Mark R. Wilson, and Vasily S. Oganessian, 50th Annual School of Chemistry Research

Colloquium - September 17, 2014, School of Chemistry, University of East Anglia, Norwich, UK, EU (poster).

**11.** Coarse-grained molecular dynamics simulations show disruption of lipid vesicles by apolipoprotein A-I and the amphipathic peptide 4F: Molecular mechanism for formation of discoidal HDL, Andrea Catte, Martin K. Jones, William D. Hancock, Geeta Datta, Medha Manchekar, Palgunachari N. Mayakonda, Vinod Mishra, G. M. Anantharamaiah, and Jere P. Segrest, 57th Biophysical Society Annual Meeting - February 2-6, 2013, Philadelphia, Pennsylvania, USA (poster).

**12.** From Discoidal to Spheroidal HDL particles through All Atom and Coarse Grained Molecular Dynamics simulations, Andrea Catte, Timo Vuorela, Perttu Niemelä, Teemu Murtola, Jere P. Segrest, Siewert-Jan Marrink, Mikko Karttunen, and Ilpo Vattulainen, 7th European Conference on Computational Biology - September 22-26, 2008, Cagliari, Sardinia, Italy, EU (poster).

**13.** Preliminary Models of Spheroidal HDL particles through Molecular Dynamics, Andrea Catte, James C. Patterson, Martin K. Jones, Denys Bashtovyy, Feifei Gu, Ling Li, Aldo Rampioni, Durba Sengupta, Perttu Niemelä, Ilpo Vattulainen, Siewert-Jan Marrink and Jere P. Segrest, 41st Annual Conference of the Finnish Physical Society - March 15-17, 2007, Tallinn, Estonia, EU.

**14.** Preliminary Models of Spheroidal HDL particles through Molecular Dynamics, Andrea Catte, James C. Patterson, Martin K. Jones, Denys Bashtovyy, Feifei Gu, Ling Li, Aldo Rampioni, Durba Sengupta, Perttu Niemelä, Ilpo Vattulainen, Siewert-Jan Marrink and Jere P. Segrest, 51st Biophysical Society Annual Meeting - March 3-7, 2007, Baltimore, Maryland, USA.

**15.** Preliminary Models of Spheroidal HDL particles through Molecular Dynamics, Andrea Catte, James C. Patterson, Martin K. Jones, Denys Bashtovyy, Feifei Gu, Songlin Li, Marcela P. Aliste, Stephen C. Harvey, Ling Li, Gilbert Weinstein, Aldo Rampioni, Durba Sengupta, Siewert Jan Marrink and Jere P. Segrest, 15th South East Lipid Research Conference – September 22-24, 2006, Callaway Gardens, Georgia, USA (poster).

**16.** Novel Protein-Lipid Conformations of High Density Lipoproteins through Molecular Dynamics, Andrea Catte, James C. Patterson, Martin K. Jones, W. Gray Jerome, Denys Bashtovyy, Zhengchang Su, Feifei Gu, Jianguo Chen, Marcela P. Aliste, Stephen C. Harvey, Ling Li, Gilbert Weinstein and Jere P. Segrest, 50th Biophysical Society Annual Meeting - February 18-22, 2006, Salt Lake City, Utah, USA.

**17.** Novel Protein-Lipid Conformations of High Density Lipoproteins through Molecular Dynamics, Andrea Catte, James C. Patterson, Gilbert Weinstein, Zhengchang Su, Ling Li, Jianguo Chen, Martin K. Jones, Marcela P. Aliste, Stephen C. Harvey and Jere P. Segrest, The Protein Society 19th Symposium - July 30 - August 3, 2005, Boston, Massachusetts, USA (poster).

**18.** Novel Protein-Lipid Conformations of High Density Lipoproteins through Molecular Dynamics, Andrea Catte, James C. Patterson, Gilbert Weinstein, Zhengchang Su, Ling Li, Jianguo Chen, Martin K. Jones, Marcela P. Aliste, Stephen C. Harvey and Jere P. Segrest, Bio-Image Summer School - Visualization, Manipulation and Modeling of Single Biomolecules – Ecole Normale Supérieure July 11-22, 2005, Paris, France, EU (poster).

**19.** Discoidal Complexes of Apolipoprotein A-I with Different Phospholipids Share a Common Model for Size Heterogeneity, Jianguo Chen, James C. Patterson, Andrea Catte, Jere P. Segrest, Ling Li, American Heart Association 6th Annual Conference on Arteriosclerosis, Thrombosis and Vascular Biology - 28-30 April 2005, Grand Hyatt Washington, Washington, DC, USA (poster).

**20.** Molecular Dynamics Simulations of Protein-Encapsulated Lipid Bilayers Converge Rapidly to form Novel Minimal Surfaces, Andrea Catte, James C. Patterson, Jianguo Chen, Ling Li, Martin K. Jones and Jere P. Segrest, 21st Annual Trainee Research Symposium - March 2, 2005, Birmingham, Alabama, USA (poster).

**21.** Multinuclear NMR Investigation of the Interaction of DNA Liquid Crystals with Divalent Metal Ions, Andrea Catte, Flaminia Cesare Marincola, Mariano Casu, Giuseppe Saba, Adolfo Lai, Alexander Korobko, Wim Jesse, Johan van der Maarel and Jan Reedijk, Biomolecular Chemistry Workshop - March 24-25, 2003, Lunteren, The Netherlands, EU (poster).

**22.** A Preliminary Multinuclear NMR Study of DNA Liquid Crystals in the absence and in the presence of Divalent Metal Ions, Andrea Catte, Flaminia Cesare Marincola, Mariano Casu, Nicoletta Zinnaros, Giuseppe Saba and Adolfo Lai, Start talk of the Marie Curie Host Fellowship - August 14, 2002, Gorlaeus Laboratories, Leiden Institute of Chemistry, Leiden University, The Netherlands, EU.

**23.** Multinuclear NMR Study of DNA Concentrated Aqueous Solutions in the absence and in the presence of Divalent Metal Ions, Andrea Catte, Flaminia Cesare Marincola, Mariano Casu, Giuseppe Saba and Adolfo Lai, La Parola ai Giovani III Edition - June 13-14, 2002, Cittadella Universitaria di Monserrato of the University of Cagliari, Cagliari, Sardinia, Italy, EU.

**24.** Multinuclear NMR investigation of the anisotropic system NaDNA/Ethidium Bromide, Andrea Catte, Flaminia Cesare Marincola, Mariano Casu, Giuseppe Saba and Adolfo Lai, XXXI° Congresso Nazionale di Risonanze Magnetiche - September 19-22, 2001, Plesso Biotecnologico of the University of Parma, Parma, Emilia Romagna, Italy, EU (poster).

**25.** Multinuclear NMR Study of Isotropic and Anisotropic Na-DNA Aqueous Solutions in absence and in presence of Ethidium Bromide, Andrea Catte, Flaminia Cesare Marincola, Mariano Casu, Giuseppe Saba and Adolfo Lai, La Parola ai Giovani II Edition - April 23-24, 2001, Cittadella Universitaria di Monserrato of the University of Cagliari, Cagliari, Sardinia, Italy, EU.

#### **Altre attività scientifiche**

**01/06/2006 - 30/06/2006** Career Enhancement Award Fall 2005-2006 Internship: attività di ricerca svolta presso il Molecular Dynamics Group dell'Università di Groningen, Paesi Bassi, sotto la supervisione del Prof. Siewert Jan Marrink.

Membro della Biophysical Society (USA) dal **11/03/2005**

#### **Ulteriori informazioni pertinenti**

**2006** Preliminary Models of Spheroidal HDL particles through Molecular Dynamics, Andrea Catte, James C. Patterson, Martin K. Jones, Denys Bashtovyy, Feifei Gu, Marcela P. Aliste, Stephen C. Harvey, Ling Li, Gilbert Weinstein and Jere P. Segrest, Emory University Lectureship Award, Poster presentation award - April 3, 2006 Atlanta, Georgia, USA.

**2005** Career Enhancement Awards Fall 2005-2006 Andrea Catte, James C. Patterson, Martin K. Jones, Denys Bashtovyy, Feifei Gu, Marcela P. Aliste, Stephen C. Harvey, Ling Li, Gilbert Weinstein and Jere P. Segrest, provided by the Office of Postdoctoral Education of the University of Alabama at Birmingham, Birmingham, Alabama, USA.

#### **Competenze professionali e conoscenze informatiche**

- Esperto nella realizzazione di simulazioni di dinamica molecolare (MD) atomistiche e coarse grained di varie molecole biologicamente rilevanti usando tra i più noti MD software packages, quali NAMD, GROMACS e AMBER.
- Ampia conoscenza di diversi software di Molecular Modeling, quali VMD, Chimera e RasMol.
- Conoscenza del linguaggio di programmazione Tcl per l'analisi di simulazioni MD.
- Conoscenza di diversi software di Molecular Docking, quali AutoDock, AutoDock Tools e AutoDock Vina.
- Ampia esperienza nel lavorare in ambienti Unix.
- Conoscenza di diversi software, quali GIMP, LaTeX, Texmaker, MATLAB, OpenOffice, Office, Origin e Kaleidagraph, diversi sistemi operativi, quali Ubuntu, Unix/Linux, Windows, web browsers, quali Mozilla Firefox e Internet Explorer, e del blog tool Wordpress.

Luogo e data

Cagliari 23/03/2021