

Curriculum Vitae

INFORMAZIONI PERSONALI

Nome GRAZIA
Cognome COTTONE
Recapiti Dipartimento di Fisica e Chimica
Telefono 339-09123891713
E-mail grazia.cottone@unipa.it
grazia.cottone@gmail.com

FORMAZIONE TITOLI

-Luglio 1994: Laurea in Fisica presso l'Università degli Studi di Palermo, tesi su "Simulazione di Dinamica Molecolare delle forze indotte dal solvente su una coppia di soluti modello idrofobico-idrofilico", Relatore: Prof. S. L. Fornili;

-Febbraio 1995: Vincitrice di una borsa di studio del Consiglio Nazionale delle Ricerche nell'ambito della tematica "Struttura della Materia", cui ha rinunciato, in quanto vincitrice della borsa di cui al punto seguente;

-Marzo 1995-Novembre 1997:Borsa di studio di Dottorato di Ricerca in Fisica, X ciclo, presso il Dipartimento di Scienze Fisiche ed Astronomiche dell'Università degli studi di Palermo;

-Luglio 1998: Dottorato di Ricerca in Fisica presso l'Università degli Studi di Palermo, tesi su "Aspetti microscopici delle interazioni solvente-soluto: uno studio simulativo delle soluzioni acquose di modelli di soluti idrofilici ed idrofobici e di una molecola anfifilica", Supervisore: Prof. S. L. Fornili;

-Novembre-Dicembre 1998: Incarico di collaborazione professionale esterna con l'Istituto Nazionale di Fisica della Materia, per lo svolgimento di attività di ricerca sul tema: "Simulazioni di mioglobina in trealosio"; Supervisore: Prof. L. Cordone;

-Gennaio-Marzo 1999:Incarico di collaborazione professionale esterna con il Consiglio Nazionale delle Ricerche, per lo svolgimento di attività di ricerca sul tema: "Studio quanto-meccanico ab initio delle proprietà molecolari dei fotoisomeri di un fotorecettore sintetico"; Supervisore: Prof. S. L. Fornili;

-Aprile-Luglio 1999:Incarico di collaborazione professionale esterna con l'Istituto Nazionale di Fisica della Materia (Unità di Palermo e Roma La Sapienza), per lo svolgimento di attività di ricerca sul tema: "Simulazioni di Dinamica Molecolare di mioglobina in soluzioni concentrate di trealosio"; Supervisor: Prof. L. Cordone, Prof. G. Ciccotti;

-Settembre 1999-Settembre 2000: Incarico di collaborazione professionale esterna con il Dipartimento di Fisica dell'Università di Roma La Sapienza, per lo svolgimento di attività di ricerca sul tema: "Simulazioni di Dinamica Molecolare di mioglobina in soluzioni concentrate di trealosio"; Supervisore: Prof. G. Ciccotti;

-Novembre 2000-Ottobre 2004:Titolare di assegno di ricerca presso il Dipartimento di Scienze Fisiche ed Astronomiche di Palermo, per lo svolgimento d'attività di ricerca sul tema: "Studio della dinamica di proteine in relazione alla rigidità della matrice estrema"; Supervisore Prof. Lorenzo Cordone;

Dicembre 2004:Nominata ricercatore universitario per il settore scientifico-disciplinare FIS/07 della Facoltà di Scienze MM.FF.NN, D.R n. 6524 del 30-12-2004;
Dal Dicembre 2007: Ricercatore confermato per il settore scientifico-disciplinare FIS/07;

Dal Settembre 2009 al Settembre 2011: Congedo per motivi di studio e ricerca, postdoc Fellowship presso University College of Dublin,School of Physics;

Dal Settembre 2011 al Novembre 2017: Visiting Senior Lecturer presso University College of Dublin, School of Physics.

Dal Gennaio 2014, Visitor at CECAM.IRL, nodo irlandese del CECAM.

Dal Ottobre 2016 Abilitazione Scientifica Nazionale per il Settore Concorsuale 02/B3 (attualmente 02/D1), Area 02-II Fascia

ATTIVITA' DIDATTICA

A.A. 2001/2002:

Contratto d'insegnamento della disciplina "Elementi di Fisica" (5 CFU), corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Facoltà di Scienze MM.FF.NN., Università degli Studi di Palermo.

Attività seminariale di supporto al corso di Biofisica, Laurea Specialistica in Fisica, sul tema:

"Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dai sistemi atomici semplici alle biomolecole".

A.A. 2002/2003:

Contratto d'insegnamento della disciplina "Elementi di Fisica" (5 CFU), corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Facoltà di Scienze MM.FF.NN., Università degli Studi di Palermo

A.A. 2003/2004:

Contratto d'insegnamento della disciplina "Elementi di Fisica" (5 CFU), corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Facoltà di Scienze MM.FF.NN., Università degli Studi di Palermo

A.A. 2004/2005:

Affidamento incarico di docenza della disciplina "Elementi di Fisica" (5+1 CFU), corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso base, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso sdoppiato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Attività seminariale (8 ore) di supporto al corso di Biofisica Molecolare, Laurea specialistica in Fisica, conducendo tre seminari sul tema: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dai sistemi atomici semplici alle biomolecole".

A.A. 2005/2006:

Incarico di supplenza della disciplina "Elementi di Fisica" (5+1 CFU) corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso base, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso sdoppiato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Attività seminariale (8 ore) di supporto al corso di Fisica dei Biosistemi, Laurea specialistica in Fisica, conducendo tre seminari sul tema: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dai sistemi atomici semplici alle biomolecole".

A.A. 2006/2007:

Incarico di supplenza della disciplina "Elementi di Fisica" (5+1 CFU) corso sdoppiato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso base, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Attività seminariale (6 ore) di supporto al corso di Dinamica delle Proteine, Laurea triennale in Scienze Biologiche, sul tema: "La comprensione della struttura/dinamica/funzione delle proteine, al livello atomico: LE SIMULAZIONI AL CALCOLATORE".

Attività seminariale (12 ore) a supporto al corso di Fisica dei Biosistemi, Laurea specialistica in Fisica, sul tema: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dai sistemi atomici semplici alle biomolecole".

Attività di tutoraggio di supporto al corso di Proprietà Strutturali della Materia Biologica, Laurea specialistica in Fisica.

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi, responsabile: Prof. L Cordone

A.A. 2007/2008

Incarico di supplenza della disciplina "Elementi di Fisica" (5+1 CFU) corso sdoppiato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi, responsabile: Prof. L Cordone

A.A. 2008/2009

Corso di esercitazioni (assistenza in laboratorio) per il corso di "Laboratorio di Fisica IV" (2 CFU,32 ore), Corso di Laurea Triennale in Scienze Fisiche, responsabile: Prof. A. Emanuele .

Corso di esercitazioni (assistenza in laboratorio, 16 ore) per il corso di "Laboratorio di Biofisica I", Laurea specialistica in Fisica responsabile: Prof. A. Emanuele

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi, responsabile: Prof. L Cordone

A.A.2009-2010 e A.A. 2010-2011

Congedo per motivi di studio e ricerca presso University College of Dublin, School of Physics.

Co-supervisor di tesi di dottorato presso l'Advanced Molecular Simulation Research Laboratory, University College of Dublin, School of Physics

A.A. 2011-2012

Corso di Fisica dei Biosistemi (5+1 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi, responsabile: Prof. A. Emanuele

A.A. 2012-2013

Corso di Fisica dei Biosistemi (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi, responsabile: Prof. A. Emanuele

A.A. 2013-2014

Corso di Fisica dei Biosistemi (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi

A.A. 2014-2015

Corso di Fisica dei Biosistemi (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi

A.A. 2015-2016

Corso di Fisica dei Biosistemi (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi

A.A. 2016-2017

Corso di Fisica dei Biosistemi (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso di Elementi di Biofisica (6 CFU), per il corso di Laurea Specialistica in Biologia Cellulare e Molecolare.

A.A. 2017-2018

Corso di Elementi di Biofisica (6 CFU), per il corso di Laurea Specialistica in Biologia Cellulare e Molecolare.

A.A. 2018-2019

Corso di Elementi di Biofisica (5+1 CFU), per il corso di Laurea Specialistica in Biologia Cellulare e Molecolare.

Corso di Fisica Computazionale (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso di Fisica dei Biosistemi (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Partecipazioni a commissioni per gli esami di profitto dei seguenti corsi:

Fisica, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Palermo;

Fisica con Esercitazioni, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Palermo;

Fisica con Esercitazioni, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Trapani;

Elementi di Fisica con Esercitazioni, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Palermo;

Elementi di Fisica, Corso di Laurea in Biologia Marina, Trapani;

Fisica e Chimica Fisica, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Palermo;

Fisica e Chimica Fisica, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Trapani;

Fisica, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Polo di Caltanissetta;

Fisica, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Termini Imerese;

Laboratorio di Fisica, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Palermo;

Laboratorio di Fisica, Corso di Laurea in Biologia Marina, Trapani

Elementi di Fisica Applicata, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Polo di Caltanissetta;

Elementi di Biofisica, Laurea Specialistica in Biologia Cellulare e Molecolare, Palermo;

Elementi di Biofisica, Laurea Magistrale in Biologia Molecolare e della Salute, Palermo;

Biofisica, Laurea Specialistica in Biologia Cellulare e Molecolare, Palermo;

Fisica, Corso di Laurea in Scienze Geologiche;

Biofisica e Biostrumentazione, Corso di Laurea in Biotecnologie, Palermo;

Biofisica e Biostrumentazione con esercitazioni, Corso di Laurea in Biotecnologie, Palermo;

Fisica Applicata, corso di Laurea in Odontoiatria e Protesi Dentaria;

Fisica dei Biosistemi, Corso di Laurea Magistrale in Fisica;

Biofisica con Laboratorio, Corso di Laurea Magistrale in Fisica;

Fisica dei sistemi complessi, Corso di Laurea Magistrale in Fisica;

Laboratorio di Biofisica I, Corso di Laurea Specialistica in Fisica;

Laboratorio di Fisica IV, Laurea Triennale Scienze Fisiche;

Informatica e programmazione, Laurea Triennale Scienze Fisiche;

E' stata correlatore di tesi di laurea di primo livello, Laurea in Fisica (A.A: 2005/2006); "Applicazione del metodo di scaling multidimensionale alla ricerca di stati intermedi in una simulazione di unfoldin di beta-lactoglobulina ", studente: Nicolo' lo Piparo

E' stata relatore di tesi di laurea Magistrale, Laurea in Fisica (A. 2013/2014): "Studio sperimentale e modello computazionale degli effetti della malattia di Alzheimer sui neuroni piramidali CA1 dell'ippocampo", studente: Sonia Ruggeri

E' stata Co-supervisor di tesi di dottorato presso l'Advanced Molecular Simulation Research Laboratory, University College of Dublin, School of Physics (2010/2013) "Large-scale conformational changes in acetylcholine-binding protein", studente: Zeynab Hosseini.

E' stata tutor universitario del tirocinio svolto dallo studente Antonino Madonia presso l' IBF-CNR Palermo su: "Studio di Neuroserpina Tramite Spettroscopia di Dicroismo Circolare", 25-29 Luglio 2016.

E' stata revisore esterno della tesi di Dottorato: "Slow Dynamics of Supercooled Water in Biological and Glass Forming Solutions" della Dr. Gaia Camisasca, Dottorato in Fisica – Università di Roma 3, Ciclo XXIX , Novembre 2016

RICERCHE FINANZIATE

-Progetto di Supercalcolo presso il centro di calcolo Irish Center for High-End Computing - ICHEC, www.ichec.ie, classe C, 25000 ore-nodo: "Large Scale Conformational Transitions In Ligand Gated Ion Channels Benchmarking" Aprile 2010-Aprile 2011

-Progetto di Supercalcolo presso il centro di calcolo ICHEC, classe C, 25000 ore-nodo: "Kinetics of geminate recombination of nitric oxide in myoglobin mutants in water, under continuous photo-illumination, with Non Equilibrium Molecular Dynamics" , Settembre 2010-Settembre 2011

-Progetto di Supercalcolo presso il centro di calcolo ICHEC, classe A, 958.000 ore-nodo: "Large Scale Conformational Transitions In Ligand Gated Ion Channels", Settembre 2010-Settembre 2013, peer reviewed

-Progetto di Supercalcolo DEISA-DECI tier-1, PRACE-Partnership for Advanced Computing in Europe, presso centro di calcolo ICHEC, LGICTAMD, 1020000 ore-nodo, Novembre 2011-Ottobre 2013, peer reviewed

-Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe B, presso il CINECA, "Large scale motions in models of human nicotinic receptors – LSMNICO", 4000000 ore-nodo, Marzo 2013-Marzo 2014, peer reviewed

-Progetto di supercalcolo presso il centro di calcolo ICHEC, classe C, 60000 ore-nodo: "Determination of the free energy difference between two conformations of the trans-membrane n-acetylcholine receptor beta-subunit" , Aprile 2014-marzo 2015

-Progetto di Supercalcolo presso il centro di calcolo ICHEC, classe B, 800000 ore-nodo: "A full atomistic computational study of the active and inactive states of the human $\alpha 7$ nicotinic receptor.", Marzo 2016-Settembre 2017, peer reviewed

-Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe C, presso il CINECA, "CLOSINICO-A full atomistic computational study of the closed state of the human $\alpha 7$ nicotinic receptor", 1000000 ore nodo, Aprile 2016-Gennaio 2017

-Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe B, presso il CINECA, "A full atomistic computational study of the ion permeation in the human $\alpha 7$ nicotinic receptor-IONLGIC", 10000000 ore nodo, Luglio 2016-Novembre 2017, peer reviewed

-Progetto di Supercalcolo DECI- PRACE- Partnership for Advanced Computing in Europe, tier-1, presso Poznan Supercomputing and Networking Center (PSNC), "Molecular dynamics study of ion permeation in wild-type and mutants of the human $\alpha 7$ nicotinic receptor-MDNICO", 2940000 ore-nodo, Luglio 2017-Luglio 2018, peer reviewed

-Scientific Host per il progetto: HPC Europa 3: "Transnational Access Programme for a Pan-European Network of HPC Research Infrastructures and Laboratories for scientific computing" <http://www.hpc-europa.org/>, anni 2017-2021

INCARICHI / CONSULENZE

Revisore MIUR, Settori dell' European Research Council: PE319, PE413, LS1-6, LS211, LS214 (Bando PRIN 2009, Bando FIRB 2013, Bando SIR 2014, Bando Montalcini 2015)

Iscritta all'albo REPRISE - Register of Expert Peer Reviewers for Italian Scientific Evaluation

Revisore MIUR per la VQR 2011-14

Revisore di Progetti di calcolo ad alte prestazioni per conto di ISCRA-CINECA

Revisore di Progetti di calcolo ad alte prestazioni per conto del consorzio PRACE, Partnerships for Advanced Computing in Europe, pan-European Research Infrastructure for HPC

Membro del Prioritization Panel-PRACE 9th Regular Call, Panel of Biochemistry, Bioinformatics and Life sciences, Bruxelles, Luglio 2014

Scientific Host per conto di HPC-EUROPA3-<http://www.hpc-europa.org/>

ASSOCIAZIONI SCIENTIFICHE

SIF, SIBPA, BIOPHYSICAL SOCIETY

PUBBLICAZIONE

F.Brugè, G.Cottone e S.L.Fornili: "Solute-solute solvent induced interaction: Molecular Dynamics simulation of a mixed model system in water", Chem. Phys. Letters, 235, 402-409, 1995

F.Brugè, G.Cottone, R.Noto e S.L.Fornili: "Microscopic aspects of solute-solute interactions induced by the solvent", J. Chim.Phys., 93, 1858-1878, 1996

G.Cottone, R.Noto e S.L.Fornili: "Water interaction with the phenylenediamine isomers: ab initio potential evaluation and Molecular Dynamics simulation", J.Chem.Soc., Faraday Transactions, 94, 2337-2342, 1998

G.Cottone, R.Noto, G. La Manna e S.L.Fornili: "Ab initio study on the photoisomers of a nitro-substituted spiropyan", Chem.Phys.Letters, 319, 51-59, 2000

G.Cottone, L.Cordone e G.Ciccotti: "Molecular Dynamics simulation of carboxy-myoglobin embedded in a trehalose-water matrix", Biophysical J., 80, 931-938, 2001

G. Cottone, L. Cordone e G. Ciccotti: "Molecular Dynamics simulation of myoglobin in a trehalose- water system" in Science and Supercomputing at Cineca: 2001 Report, pagg. 517-521

L. Maragliano, G. Ciccotti, G. Cottone e. L. Cordone: "Molecular Dynamics simulation of α -glycosidase from Sulfolobus

Solfataricus" in Science and Supercomputing at Cineca: 2001 Report, pagg. 131-137

G. Cottone, G. Ciccotti e L. Cordone: "Protein-trehalose-water structures in trehalose coated carboxy-myoglobin", J. Chem. Phys., 117, 9862-9866, 2002. Il lavoro N.6 è stato selezionato per il numero del 15 Novembre 2002, vol. 4, del Virtual Journal of Biological Physics Research, www.vjbio.org

S. Giuffrida, G. Cottone, F. Librizzi e L. Cordone, "Coupling between the thermal evolution of heme pocket and external matrix structure in trehalose coated carboxy-myoglobin", J. Phys. Chem B, 107: 13211-13217, 2003

L. Maragliano, G. Cottone, L. Cordone e G. Ciccotti "Atomic mean square displacements in proteins by Molecular Dynamics: a case for analysis of variance" Biophysical J., 86, 2765-2772, 2004

G. Cottone, R. Noto, e G. La Manna "Theoretical study of spiropyran-merocyanine thermal isomerization", Chem. Phys. Letter, 388, 218-222, 2004

S. Giuffrida, G. Cottone, e L. Cordone, "Structure-dynamics coupling between protein and external matrix in sucrose coated and in trehalose coated MbCO: a FTIR study", J. Phys. Chem B, 108, 15415-15421, 2004

S. Giuffrida, G. Cottone, F. Librizzi e L. Cordone, "Thermal evolution of heme pocket structure in trehalose coated carboxy-myoglobin probed by FTIR measurements", in Progress in Condensed Matter Physics: Festschrift in honour of Vincenzo Grasso, edito da G. Mondio e L. Sipigni, Messina, 2004, pp 131-138

G. Cottone, S. Giuffrida, G. Ciccotti, e L. Cordone "Molecular Dynamics simulation of sucrose coated and trehalose coated carboxy-myoglobin", Proteins, 59, 291-302, 2005

G. Cottone, L. Cordone, S. Giuffrida e G. Ciccotti: "Protein-solvent coupling in myoglobin/sugar/water systems: a Molecular Dynamics study" in Science and Supercomputing at Cineca: 2005 Report, pagg. 578-584.

L. Cordone, G. Cottone, S. Giuffrida, G. Palazzo, G. Venturoli, C. Viappiani "Internal Dynamics and Protein-Matrix Coupling in Trehalose Coated Proteins", Biochimica et Biophysica Acta Proteins and Proteomics, 2005, 1749, 252-281

S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone " Role of Solvent on Protein-Matrix Coupling in MbCO Embedded in Water-Saccharide Systems: an FTIR study. Biophysical J., 91, 968-980, 2006

G. Cottone, "A comparative study of carboxy myoglobin in saccharide/water systems by Molecular Dynamics Simulation" J. Phys. Chem B, 111, 3569, 2007

L. Cordone, G. Cottone, S. Giuffrida "Role of residual water hydrogen bonding in sugar/water/biomolecule systems: a possible explanation for trehalose peculiarity" J. Phys.: Condens. Matter, 2007, 19, 205110

L. D'Alfonso, M. Collini, F. Cannone, G. Chirico, B. Campanini, G. Cottone, L. Cordone, " Single Molecule Study of GFP-mut2 Proteins Caged in Trehalose-Water Matrixes: Spatially Inhomogeneous Protein-Water-Sugar Structures", Biophysical J., 2007, 93, 284-293

L. Cordone, G. Cottone, S. Giuffrida, F. Librizzi, "Thermal evolution of the CO stretching band in carboxy-myoglobin in the light of neutron scattering and molecular dynamics simulations", Chem. Phys, 2008

G. Cottone, R. Noto, G. La Manna, "Density Functional Theory study of the TTC > TTT Isomerization of a Photochromic Spiropyran Merocyanine", Molecules, 13, 2008

- G. Bellavia, G. Cottone, S. Giuffrida, A. Cupane, L. Cordone, *J Phys Chem B*, 112, 11543-11549, 2009
- L. Maragliano, G. Cottone, E. Vanden-Eijnden, G. Ciccotti, "Mapping the network of pathways of CO diffusion in myoglobin", *J. Am. Chem. Soc.*, 2010, 132, 1010–1017
- A.Longo, S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone, "Myoglobin embedded in saccharide amorphous matrices: water-dependent domains evidenced by Small Angle X-Ray Scattering", *PCCP*; 2010
- S. Giuffrida, G. Cottone, E. Vitrano, L. Cordone, "A FTIR study on low hydration saccharide amorphous matrices: thermal behaviour of the water association band" ,*J. Non-Cryst.Solids*, 2011
- S. Giuffrida, G. Cottone, A. Longo, L. Cordone, "Proteins in amorphous saccharides: structural and dynamical insights on bioprotection, in " Dynamics of biological molecules by neutron scattering", invited review, Editor S. Magazù, Bentham Science, Dubai, Uae, 2011
- G. Bellavia, S. Giuffrida, G. Cottone, A. Cupane, L. Cordone, "Protein thermal denaturation and matrix glass transition in different protein-trehalose-water systems", *J. Phys. Chem. B*, 115, 6340-6346, 2011
- G.Cottone, G. Lattanzi, G. Ciccotti, R. Elber, Multiphoton Absorption of Myoglobin–Nitric Oxide Complex: Relaxation by D-NEMD of a Stationary State, *J. Phys. Chem. B*, 116 (10), pp 3397–3410, 2011
- S. Giuffrida, G. Cottone, G. Bellavia, L. Cordone, Proteins in amorphous saccharide matrices: Structural and dynamical insights on bioprotection, *Eur. Phys. J. E* (2013) 36: 79
- Z. HosseiniNaveh, T. Malliavin, L. Maragliano, G. Cottone, G. Ciccotti, Conformational changes in acetylcholine binding protein investigated by Temperature Accelerated Molecular Dynamics, *PLOS ONE*, 9, e88555, 2014
- L. Cordone, G.Cottone, A. Cupane, A. Emanuele, S. Giuffrida, M.Levantino, Immobilization of proteins in polysaccharide matrices: biochemical and biophysical properties, *Current Organic Chemistry*, 19(17): 1684-1706, 2015
- M.Levantino,G.Schirò,H.T.Lemke,G.Cottone, J.M.Glownia,D. Zhu, M.Chollet,H. Ihee, A.Cupane, M.Cammarata, Ultrafast protein structural dynamics observed with an X-ray free electron laser, *Nature Communications*, 6,6772, 2015
- L.Chiodo, T.E. Malliavin, L. Maragliano, G.Cottone, G. Ciccotti, A structural model of the human alpha7 nicotinic receptor in an open conformation,*Plos One*, 10, e0133011, 2015
- M Levantino, G Schiro, LT Henrik, G Cottone, JM Glownia, D Zhu, M Chollet, H Ihee, A Cupane, M Cammarata, Observing myoglobin proteinquake with an X-ray free-electron laser, *European Biophysics Journal With Biophysics Letters*, 44, S201-S201, 2015
- S. Giuffrida, G.Cottone, L.Cordone, Water association band as a marker for hydrogen bond in trehalose amorphous matrix, 2017, *Phys Chem Chem Phys*, DOI: 10.1039/C6CP06848K
- L.Chiodo, T.E. Malliavin, L. Maragliano, G.Cottone*, A possible desensitized state conformation of the human alpha7 nicotinic receptor: a molecular dynamics study, in press, *Biophysical Chemistry*, 2017
- E. Semeraro, S. Giuffrida, G.Cottone, A.Cupane, Biopreservation of Myoglobin in Macromolecular Crowded Environment: a Comparison between Gelatin and Trehalose Matrices, *J. Phys. Chem. B*, 121, 8731-8741, 2017

G. Cottone, L. Cordone e G. Ciccotti: "Molecular Dynamics simulation of myoglobin in a trehalose- water system" in Science and Supercomputing at Cineca: 2001 Report, pagg. 517-521

L. Maragliano, G. Ciccotti, G. Cottone e L. Cordone: "Molecular Dynamics simulation of beta-glycosidase from Sulfolobus Solfataricus" in Science and Supercomputing at Cineca: 2001 Report, pagg. 131-137

S. Giuffrida, G. Cottone, F. Librizzi e L. Cordone, "Thermal evolution of heme pocket structure in trehalose coated carboxy-myoglobin probed by FTIR measurements", in Progress in Condensed Matter Physics: Festschrift in honour of Vincenzo Grasso, edito da G. Mondio e L. Sipigni, Messina, 2004, pp 131-138

G. Cottone, L. Cordone, S. Giuffrida e G. Ciccotti: "Protein-solvent coupling in myoglobin/sugar/water systems: a Molecular Dynamics study" in Science and Supercomputing at Cineca: 2005 Report, pagg. 578-584.

L. Chiodo, T.E. Malliavin, L. Maragliano, G. Cottone, G. Ciccotti: "Large scale motions in models of human nicotinic receptors", Cineca HPC Report 2014, ISBN 978-88-86037-35-8

G. Cottone, R. Noto, G. La Manna e S. L. Fornili: "Photoisomers of a nitro-substituted spiropyran: ab initio study of structural and energetic properties", Note del Polo, Nota N.17, Editore: Polo di Crema, Università degli Studi di Milano, 2000

G. Cottone Large Scale Conformational Transitions In Ligand Gated Ion Channels. in: Irish Center of High-End Computing, ICHEC-National Service Review 2012-2013. p. 34-35, 2014

In corso di revisione

Debora Salerno , Letizia Chiodo, Oceane Floriot, Grazia Cottone, Matteo Pallocca, Safaa Jeddari, Massimo Levrero, Francesca Guerrieri, "Hepatitis B protein HBs binds the DLEU2 lncRNA to sustain viral and host gene transcription", sottomesso a Nature Communication, Marzo 2018

S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone "Bioprotection can be tuned by proper protein-saccharide ratio: the case of solid amorphous matrices", sottomesso a PCCP, Marzo 2018

Elenco Comunicazioni a congressi internazionali

1. G. Cottone, R. Noto e S. L. Fornili: "Water interaction with the phenylenediamine isomers: ab initio potential evaluation and Molecular Dynamics simulation", Abstracts della NATO ASI School on "Hydration Processes in Biology: Theoretical and Experimental Approaches", Les Houches, 4-15 Maggio 1998
2. G. Cottone: "Molecular Dynamics simulation of carboxy-myoglobin embedded in a trehalose-water matrix", CECAM Workshop on: Challenges in Free energy calculations, Lione, 19-21 Giugno 2000
3. G. Cottone, L. Cordone e G. Ciccotti: "Molecular Dynamics simulation of carboxy-myoglobin embedded in a dry trehalose-water matrix", Abstracts della SIMU Conference "Bridging the Time-Scale Gap", Konstanz, 10-13 Settembre 2001
4. L. Maragliano, G. Cottone, L. Cordone e G. Ciccotti: "Molecular Dynamics simulations of β -Glycosidase enzyme", Abstracts della SIMU Conference "Bridging the Time-Scale Gap", Konstanz, 10-13 Settembre 2001
5. G. Cottone, G. Ciccotti e L. Cordone: "Protein trehalose water structures in trehalose coated carboxy-myoglobin", ESS Workshop "Flexibility and Function of proteins, Heidelberg, 25-27 Gennaio 2002
6. L. Maragliano, G. Cottone, L. Cordone e G. Ciccotti: "Molecular Dynamics simulations of β -glycosidase from thermophilic Sulfolobus Solfataricus and a mesophilic homologue", ESS Workshop "Flexibility and Function of proteins, Heidelberg, 25-27 Gennaio 2002
7. R. Noto, G. Cottone e G. La Manna: "Theoretical calculation of the activation energy of a spiropyran-merocyanine isomerization", WATOC 2002, VI World Congress of Theoretically Oriented Chemistry, 4-9 Agosto 2002, Lugano, Svizzera
8. G. Cottone, R. Noto e G. La Manna: "Theoretical calculation of the activation energy of a spiropyran-merocyanine isomerization", Mediterranean Seminar on Computational Chemistry for Complex Systems, 4-7 Ottobre 2002, Palermo
9. G. Cottone, G. Ciccotti e L. Cordone: "Protein trehalose water structures in trehalose coated carboxy-myoglobin", Mediterranean

Seminar on Computational Chemistry for Complex Systems, 4-7 Ottobre 2002, Palermo

10. G. Cottone, G. Ciccotti e L. Cordone: "Protein trehalose water structures in trehalose or sucrose coated carboxy-myoglobin", 295 WE-Heraeus Seminar "Biological Physics of Proteins. Structure, Flexibility and Function, 10-12 Febbraio 2003, Bad Honnef, Germania

11. S. Giuffrida, G. Cottone e L. Cordone "Thermal evolution of protein and matrix dynamics and structure in glassy and plasticized amorphous carboxy-myoglobin samples". 295 WE-Heraeus Seminar "Biological Physics of Proteins. Structure, Flexibility and Function, 10-12 Febbraio

2003, Bad Honnef, Germania

12. S. Giuffrida, Cottone G., L. Cordone. Structure-Dynamics Coupling Between Protein And External Matrix In Mbco Embedded In Various Saccharide Matrices: A Ftir Study. Icbp2004,5th International Conference On Biological Physics. Gothenburg, Svezia. 23-27 Agosto 2004

13. G. Cottone, S. Giuffrida, G. Ciccotti, L. Cordone, Molecular Dynamics Simulation Of Carboxy- Myoglobin In Trehalose And Sucrose-Water Systems. Simu 2004-Bridging The Scale. Genova, Italy. 29-31 Agosto 2004.

14. Cottone G, S. Giuffrida, G. Ciccotti E L. Cordone Molecular Dynamics Simulation Of Carboxy- Myoglobin In Trehalose And Sucrose-Water Systems. Conference On Computational Physics Ccp 2004. Genova, Italy. 1-4 Settembre 2004.

15. L. Maragliano, G.Cottone, L. Cordone E G. Ciccotti. Atomic Mean Square Displacements In Proteins By Molecular Dynamics: A Case For Analysis Of Variance. Conference On Computational Physics Ccp 2004. Genova, Italy. Conference On Computational Physics Ccp 2004, 1-4 Settembre 2004.

16. G. Cottone, S. Giuffrida, L. Cordone, "Protein-solvent coupling in carboxy- myoglobin/sugar/water systems by molecular dynamics simulations", 5th International Discussion Meeting on relaxations in Complex Systems, 6-13 Luglio 2005, Lille, Francia.

17. S.Giuffrida, G. Cottone, L.Cordone: " Water association band as a marker of the matrix structure in amorphous saccharide and saccharide-protein samples",5th International Discussion Meeting on relaxations in Complex Systems, 6-13 Luglio 2005, Lille, Francia

18. G. Cottone, " Molecular dynamics simulations complement experimental data on protein embedded in sugar-water systems.", BIONEUTRON 2006, Taormina 7-10 Ottobre 2006.

19. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone "The Role of Solvent on Protein-Matrix Coupling in MbCO Embedded in Water-Saccharide Systems", BIONEUTRON 2006, Taormina 7-10 Ottobre 2006

20. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone, "Water association band: an useful tool for studying the water structure in samples of low water content" BIONEUTRON 2006, Taormina 7-10 Ottobre 2006.

21. L. Cordone, G. Cottone, S. Giuffrida, " Interconversion among low tier substates in MbCO: an FTIR, Neutron Scattering and Molecular Dynamics simulation study", Protein at Works 2007, Perugia 28-30 Maggio 2007

22. L. D'Alfonso, M. Collini, G. Chirico, B. Campanini, G. Cottone, L. Cordone, " GFP-mut2 proteins in trehalose-water matrixes: spatially heterogeneous protein-water-sugar structure" 6th European Biophysics Congress, Londra 14-18 Luglio 2007

23. L. Maragliano, G. Cottone, L. Cordone, E. Vanden-Eijnden, G. Ciccotti, Mapping the Free Energy landscape of CO diffusion in Myoglobin, EPS-CMD 22, Roma, Agosto 2008

24. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone, "Protein-matrix Coupling in MbCO embedded in saccharide matrices", 3rd ERA-Chemistry Flash Conference, Killarney (IRL), 09-13/03/2008.

25. L. Maragliano, G. Cottone, E. Vanden-Eijnden, G. Ciccotti, Institute for pure and applied mathematics, UCLA, 23-27 Febbraio 2009

26. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone, FTIR study on reciprocal protein matrix effects in dry amorphous saccharide systems, 6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Roma 30 Agosto-5Sept 2009

27. G. Bellavia, G. Cottone, S. Giuffrida, L. Cordone, A. Cupane Relationship between the glass transition of myoglobin-water-disaccharide systems and protein thermal denaturation, 6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Roma 30 Agosto-5Sept 2009

28. A. Longo, S. Giuffrida, M. Panzica, G. Cottone, L. Cordone Saxs and ftir study on mbco-saccharide amorphous systems, 6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Roma 30 Agosto-5Sept 2009

29. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone, Thermal behavior of dry and hydrated mbco crowded systems, 6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Roma Agosto-5Sept 2009

30. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone, MbCO matrix reciprocal effects in low hydration amorphous saccharide systems: a FTIR study, 13 th ECSBM , Palermo, August 28 – September 2, 2009

31. A. Longo, S. Giuffrida, M. Panzica, G. Cottone, L. Cordone Saxs and ftir study on mbco-saccharide amorphous systems, 13th ECSBM , Palermo, August 28 – September 2, 2009

32. L. Maragliano, G. Cottone, G. Ciccotti, E. Vanden-Eijnden, Mapping CO diffusion paths in Myoglobin with the Single Sweep Method, 54th Biophys. Soc Meeting, S. Francisco, 19-24 Febbraio 2010, vedi in Biophys J., 98, 582, 2010

33. S. Giuffrida, A. Longo, G. Cottone, L. Cordone, "FTIR and SAXS study on MbCO-Saccharide amorphous systems: protein-matrix reciprocal effects", Hercules XX Symposium, Grenoble (F), 25-26/03/2010.

34. G. Bellavia, G. Cottone, S. Giuffrida, A. Cupane, L. Cordone, "Effects of the protein net charge and steric hindrance on the glass transition of protein-trehalose-water systems and on the protein thermal denaturation", Frontiers in Water Biophysics, Trieste (I), 23-26/05/2010

35. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone, "Hydrogen bond properties of saccharide matrices studied through infrared water association band", Frontiers in Water Biophysics, Trieste (I), 23-26/05/2010.

36. Bellavia G., Cottone G., Giuffrida S., Cupane A., Cordone L., "Matrix Glass Transition And Embedded Protein Denaturation: Effect of Trehalose on Different Proteins", 10th International Workshop on Non-Crystalline Solids (IWNCs10). From 21th to 23th April 2010, Barcelona, Spain.

37. S. Giuffrida, G. Cottone, A. Longo, L. Cordone, "MbCO in Saccharide Solid Amorphous Systems: A Combined FTIR and SAXS Study", 55-th Annual Meeting Biophysical Society, Baltimore, USA, 5-9 Marzo, 2011, vedi in Biophys. J. 100, 357

38. G. Lattanzi, M.L. Mugnai, G. Cottone, G. Ciccotti, R. Elber, The electric properties of ionic solutions: a molecular dynamics (preliminary)

study, 8th Liquid Matter Conference, Vienna, 6-10 Settembre 2011

39. G. Lattanzi, M.L. Mugnai, G. Cottone, G. Ciccotti, R. Elber, The electric properties of ionic solutions: a molecular dynamics (preliminary) study, Simbioma 2011-Conference on Molecular Simulations in Biosystems and Material Science, Konstanz, Germania, 28 Settembre-1 Ottobre 2011.

40. G. Cottone, G. Lattanzi, G. Ciccotti, R. Elber, Computational Modeling of Geminate Recombination and Energy Relaxation of Nitric Oxide in Myoglobin under Constant Illumination, Simbioma 2011-Conference on Molecular Simulations in Biosystems and Material

Science, Konstanz, Germania, 28 Settembre-1 Ottobre 2011.

41. Z. Hoseyni, G. Cottone, T. E. Malliavin, L. Maragliano, G. Ciccotti, Exploring the dynamics of AChBP unbound and bound to the Lobeline partial agonist, 16th Irish Atomistic Simulators and Nanoscale Simulators Ireland Meeting Trinity College Dublin, 12th - 13th January 2012

42. G. Cottone, Myoglobin: an ideal test case for new simulation methods and discovering new physics, relazione su invito, Institute Pasteur, Unité de Bioinformatique Structurale, May 9, 2012, Paris

43. G. Cottone, S. Giuffrida, L. Cordone, Proteins in amorphous disaccharides: insights on bioprotection from Molecular Dynamics simulations and FTIR experiments, 7th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Barcelona 21-26 July, 2013.

44. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone, Protein Bioprotection in disaccharides: a multiscale approach, 7th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Barcelona 21-26 July, 2013

45. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone, Cosolutes affect structure and dynamics of myoglobin-trehalose amorphous systems: a FTIR and MD study, 7th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Barcelona 21-26 July, 2013

46. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone, Water effects on saccharide matrices studied with molecular dynamics, American Chemical Society National Meeting, New Orleans, 7-11 April 2013

47. Zeynab Mohammad Hosseini Naveh, Therese E. Malliavin, Luca Maragliano, Grazia Cottone, Giovanni Ciccotti, "Conformational Changes in Acetylcholine Binding Protein Investigated by Temperature Accelerated Molecular Dynamics", CECAM workshop on "Binding

free energy and kinetics: computation meets experiments", June 10-12, 2014, at Italian Institute of Technology-Genoa (IT)

48. Letizia Chiodo, Therese E. Malliavin, Luca Maragliano, Grazia Cottone, Giovanni Ciccotti, "Molecular dynamics simulations of a new model of human $\alpha 7$ nicotinic receptor", CECAM workshop on "Binding free energy and kinetics: computation meets experiments", June 10-12,

2014, at Italian Institute of Technology-Genoa (IT)

49. E.F. Semeraro, S. Giuffrida, G. Cottone, A. Cupane, Trehalose vs gelatin: a comparison between crowding effects, *Frontiers in Water Biophysics*, Erice, 7-3 Settembre 2015.

50. L. Cordone, G. Cottone, A. Cupane, A. Emanuele, S. Giuffrida, M. Levantino, Proteins in trehalose: a consistent picture from a multitechnique approach, *Frontiers in Water Biophysics*, Erice, 7-3 Settembre 2015.

51. Letizia Chiodo, Therese E. Malliavin, Luca Maragliano, G. Cottone, Role of water in the open and closed-locked structures of the human $\alpha 7$ nicotinic receptor: a full atomistic computational study of native and mutated forms, *Frontiers in Water Biophysics 2017*, EMFCSC, XI Course International School of Statistical Physics, Erice, 23-27 Maggio 2017

Elenco Comunicazioni a congressi Nazionali

1. F. Brugè, G. Cottone e S. L. Fornili: "Solute-solute solvent induced forces: a MD simulation of an immobilized hydrophilic-hydrophobic pair in water", Abstracts del XII Congresso Nazionale della Società Italiana di Biofisica Pura e Applicata, Palermo, 23-28 Settembre 1994

2. G. Cottone, R. Noto e S. L. Fornili: "Water interaction with meta-phenylenediamine: ab initio potential evaluation and Molecular Dynamics simulation", Abstracts del Congresso Nazionale di Fisica della Materia, Chia Laguna, Cagliari, 19-23 Maggio 1997

3. G. Cottone, R. Noto e S. L. Fornili: "Proprietà dell'idratazione degli isomeri della fenilendiammina: calcolo ab initio dei potenziali di interazione e simulazione di Dinamica Molecolare", Abstracts del XIV congresso della Società Italiana di Biofisica Pura ed Applicata, Genova, 24-27 Settembre 1998

4. G. Cottone, R. Noto, G. La Manna e S. L. Fornili: "Ab initio study on the photoisomers of a nitro-substituted spiropyran", Abstracts del INFM Meeting, Catania, 14-18 Giugno 1999 CV Grazia Cottone

5. G. Cottone, L. Cordone e G. Ciccotti: "Molecular Dynamics simulation of myoglobin in concentrated trehalose solutions", Abstracts del INFM Meeting, Catania, 14-18 Giugno 1999

6. G. Cottone: "Molecular Dynamics Simulation of Trehalose Coated Carboxy-Myoglobin", INFM Meeting, Genova, 12-16 Giugno 2000, in simposio parallelo sezione B "Neutron scattering and MD simulations in biological systems"

7. G. Cottone, L. Cordone e G. Ciccotti: "Molecular Dynamics simulation of carboxy-myoglobin in a trehalose-water matrix",

- Abstracts del XV Congresso della Società Italiana di Biofisica Pura ed Applicata, Parma, 23-25 Ottobre 2000
8. G. Cottone, G. Ciccotti e L. Cordone: "Carboxymyoglobin-trehalose interaction: a Molecular Dynamics study", Abstracts del INFM Meeting, Roma, 18-22 Giugno 2001
 9. L. Maragliano, G. Cottone, L. Cordone e G. Ciccotti: "Molecular Dynamics simulation of α -glycosidase from *Sulfolobus Solfataricus*", Abstracts del INFM Meeting, Roma, 18-22 Giugno 2001
 10. L. Maragliano, G. Cottone, L. Cordone e G. Ciccotti: "Molecular Dynamics simulations of α -glycosidase from thermophilic *Sulfolobus Solfataricus* and a mesophilic homologue", Acta Biophysica Romana III Edizione, Università Cattolica del Sacro Cuore, Roma, 18 - 19 Aprile 2002
 11. G. Cottone, S. Giuffrida, G. Ciccotti e L. Cordone: "Protein-Saccharide-Water Structures in Trehalose or Sucrose-Coated MbCO: an Experimental and Simulative Study", INFM Meeting, Genova 23-25 Giugno 2003
 12. S. Giuffrida, G. Cottone e L. Cordone: "Thermal Evolution of Protein and Matrix Conformational Dynamics and Structure in Glassy and Plasticized Amorphous Carboxy-Myoglobin Samples", INFM Meeting, Genova, 23-25 Giugno 2003
 13. S. Giuffrida, G. Cottone e L. Cordone: "Structure and Dynamics in Glassy and Plasticized Amorphous Disaccharide-Water Samples: A FTIR Study". INFM Meeting, Genova, 8-10 Giugno 2004
 14. G. Cottone, S. Giuffrida, L. Cordone "Protein-Solvent coupling in carboxymyoglobin/sugar/water systems by Molecular Dynamic Simulation" Genova. 22-25 Giugno 2005 INFM Meeting
 15. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone "Water Association Band as marker of the matrix structure in amorphous saccharide and saccharide-protein samples" Genova. 22-25 Giugno 2005 INFM Meeting
 16. G. Cottone, " Protein-solvent coupling in carboxy-myoglobin-sugar-water systems Molecular Dynamics Simulations and Experiments", XCII SIF, Torino 19-22 Settembre 2006.
 17. G. Cottone, S. Giuffrida, L. Cordone Protein-solvent coupling in carboxy-myoglobin--sugar-water systems by Molecular Dynamics Simulation XVIII SIBPA, Palermo 17-2 Settembre 2006
 18. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone Role Of Solvent On Protein-Matrix Coupling In Mbco Embedded In Water-Saccharide Systems: An FTIR Study. XVIII SIBPA, Palermo 17-2 Settembre 2006
 19. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone Water association band as a marker of the matrix structure in amorphous saccharide and saccharide-protein samples XVIII SIBPA, Palermo 17-2 Settembre 2006
 20. L. D'Alfonso, M. Collini, F. Cannone, G. Chirico, B. Campanini, G. Cottone, L. Cordone Inhomogeneous Protein-Water-Sugar Structures of Single GFP-mut2 Proteins Caged in Trehalose-Water Matrixes XVIII SIBPA, Palermo 17-2 Settembre 2006
 21. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone Water association band as a marker of the matrix structure in amorphous saccharide and saccharide-protein samples, XCII SIF, Torino 19-22 Settembre 2006
 22. Cottone G., Cordone L, Maragliano L, Vanden-Eijnden, Ciccotti G. (2007). Structure-Dynamics-Function of Proteins: Molecular Dynamics Simulations of Myoglobin in Water And Complex Solvents. Grid Open Days 2007. Università Di Palermo. 6-7 Dicembre 2007.
 23. Cottone G., Maragliano L., Ciccotti G., Vanden-Eijnden E. (2008). Ricostruzione del panorama di energia libera per il processo di diffusione del CO all'interno della mioglobina IES08, Napoli 27-29 Maggio 08.
 24. Cottone, G., Giuffrida, S., Cordone, L., Atomistic MD simulation of proteins in complex solvents, Workshop finale dei Progetti Grid del PON "Ricerca" 2000-2006 - Avviso 1575, Catania 10-12 Febbraio 2009
 25. G. Cottone, Multiphoton Absorption of Myoglobin-Nitric Oxide Complex: Relaxation by D-NEMD of a Stationary State, FISMAT 2013, Milano, 9.13 Settembre 2013
 26. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone, Water effects on saccharide matrices studied with Molecular Dynamics, FISMAT 2013, Milano, 9.13 Settembre 2013
 27. Z. HosseiniNaveh, T. Malliavin, L. Maragliano, G. Cottone, G. Ciccotti, Acceleration of the AChBP conformational transition using Temperature Accelerated Molecular Dynamics, FISMAT 2013, Milano, 9.13 Settembre 2013
 28. S. Giuffrida, G. Cottone, L. Cordone, An "optimal" protein-saccharide ratio for bioprotection is present in low hydration amorphous saccharide glassy systems: a FTIR study, FISMAT 2015, Palermo, 28 Settembre-2 Ottobre 2015
 29. E.F. Semeraro, S. Giuffrida, G. Cottone, A. Cupane, Specific and aspecific effects in bioprotection of Myoglobin: a comparison between glassy trehalose and gelatin crowding, FISMAT 2015, Palermo, 28 Settembre-2 Ottobre 2015
 30. L. Cordone, G. Cottone, A. Cupane, A. Emanuele, S. Giuffrida, M. Levantino, Proteins in saccharides matrices: biochemical and biophysical aspects, FISMAT 2015, Palermo, 28 Settembre-2 Ottobre 2015
 31. Letizia Chiodo, Therese E. Malliavin, Luca Maragliano, Grazia Cottone, Giovanni Ciccotti, A new structural model of the human $\alpha 7$ nicotinic receptor in an open conformation, FISMAT 2015, Palermo, 28 Settembre-2 Ottobre 2015
 32. Letizia Chiodo, Debora Salerno, Grazia Cottone, Safaa Jeddari, Giancarlo Ruocco, Massimo Levrero, Francesca Guerrieri, Experiments and computational investigations on HBx /Dleu2 lncRNA complexes: a possible "address code" to TRIM13 target, FISMAT 2015, Palermo, 28 Settembre-2 Ottobre 2015
 33. Letizia Chiodo, Therese E. Malliavin, Luca Maragliano, Grazia Cottone, A full atomistic computational study of the open and closed-locked states of the human $\alpha 7$ nicotinic receptor, XIX SIBPA, Cortona 18-20 Settembre 2016

ATTIVITA' SCIENTIFICHE

SEMINARI E RELAZIONI SU INVITO:

"Molecular Dynamics Simulation of Trehalose Coated Carboxy-Myoglobin", INFM Meeting, Genova, 12-16 Giugno 2000;

"Molecular Dynamics simulation of carboxy-myoglobin embedded in a trehalose-water matrix", CECAM Workshop on: Challenges in Free energy calculations, Lione, 19-21 Giugno 2000, (FR);
"Protein-solvent coupling in carboxy-myoglobin/sugar/water systems by molecular dynamics simulations", 5th International Discussion Meeting on relaxations in Complex Systems, 6-13 Luglio 2005, Lille (FR);
"Protein-solvent coupling in carboxy-myoglobin-sugar-water systems: Molecular Dynamics Simulations and Experiments", XCII SIF, Torino 19-22 Settembre 2006;
"Molecular dynamics simulations complement experimental data on protein embedded in sugar-water systems", BIONEUTRON 2006, Taormina 7-10 Ottobre 2006;
"Pathways for Uptake and Expulsion of CO in Myoglobin", UCD NANOVIATION Launch Event, 14 ottobre 2009, Dublino
"Equilibrium and non equilibrium Molecular Dynamics simulations of biomolecules in solution and glassy matrices", Meeting congiunto CNISM-INSTM, Modeling molecolare e dei materiali, 13 Maggio 2011, Firenze
"Myoglobin: an ideal test case for new simulation methods and discovering new physics", Institute Pasteur, Unité de Bioinformatique Structurale, May 9, 2012, Parigi.
"Proteins in amorphous disaccharides: insights on bioprotection from Molecular Dynamics simulations and FTIR experiments", 7th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Barcelona 21-26 July, 2013
"Multiphoton Absorption of Myoglobin-Nitric Oxide Complex: Relaxation by D-NEMD of a Stationary State", FISMAT 2013, Milano, 9-13 Settembre 2013
"Proteins in saccharide matrices: the trehalose peculiarity and the role of water", WATER AND WATER SYSTEMS 3rd Course of the ERICE School "NEUTRON SCIENCE AND INSTRUMENTATION", 22-31 Luglio 2016, Erice (Italy)
"Proteins in saccharide matrices and the trehalose peculiarity: biochemical and biophysical aspects", CECAM Workshop on "Controlling food protein folding and aggregation: challenges and perspectives in industry, experiments and simulation", Dublin 18-20 August 2016.

"Thermodynamics and kinetics of ion translocation in the human alpha7 nicotinic receptor", CECAM Workshop on "[Multiscale modelling in electrophysiology: from atoms to organs](#)", Lugano, 26-28 marzo 2018

COLLABORAZIONI:

-Dal 1998 al 2015, col Prof. Giovanni Ciccotti, Dipartimento di Fisica, Università di Roma La Sapienza;

-Dal 2009 al 2013, col Prof. Giovanni Ciccotti, presso "Advanced Molecular Simulation Research Laboratory", University College of Dublin;

-Dal 2000- Dr. Luca Maragliano, Istituto Italiano di Tecnologia, Genova, su proteine da organismi termofili con metodi standard in MD; migrazione di leganti in eme-proteine; canali ionici ligand gated, con metodi non-standard di campionamento in MD e calcoli di energia libera;

-Dal 2010- Dr. Thérèse Malliavin, Unité de Bioinformatique Structurale, Institut Pasteur, Parigi, su moti di larga scala in canali ionici ligand-gated complessati con agonisti e antagonisti e in proteina acetylcholine binding, con metodi non standard di campionamento in MD e calcoli di energia libera;

Dal 2013- Dr. Letizia Chiodo, Università Campus Biomedico, Roma, su canali ionici ligand-gated complessati con agonisti e antagonisti, con metodi standard e non standard di campionamento in MD e calcoli di energia libera; interazione proteine virali con RNA non coding coi metodi di bioinformatica;

-Dal 2015- Dr. Francesca Guerrieri, Prof. Massimo Levrero, Center for Life NanoScience@Sapienza, IIT-Roma, Dipartimento di Medicina Interna-DMISM, Università di Roma La Sapienza, INSERM U1052, Cancer Research Center of Lyon (CRCL), Lione, su interazione proteine virali con RNA non coding;

-Dal 2008 al 2011- Prof. Eric Vanden-Ejinden, Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, sulla migrazione di leganti in eme-proteine con metodi non standard di campionamento in MD e calcoli di energia libera;

-Dal 2010 al 2013- Prof. Ron Elber, University of Texas at Austin, su cinetiche di ricombinazione del legante e meccanismi di transizione allosterica in eme-proteine sotto fotoilluminazione continua, con schemi computazionali semi classici nell' ambito della Non Equilibrium Molecular Dynamics;

-Dal 2011 al 2013, Dr. Gianluca Lattanzi, Dipartimento di Fisica, Università di Trento, su proprietà elettriche di soluzioni ioniche e doppi strati lipidici, con metodi di Non Equilibrium Molecular Dynamics;

-Dal 2012 al 2014 Dr. Adolfo Poma, Dr. Antonio Deiana, post doc fellow presso il Dipartimento di Fisica Università di Roma La Sapienza, su studio di metastabilità di determinazioni NMR di domini di proteine di membrana e predizione di strutture, con simulazioni MD, metodi non standard di campionamento in MD, e calcoli di energia libera.

Periodi di attività di ricerca all'estero:

Settembre 2009-Settembre 2013: Membro del laboratorio "Advanced Molecular Simulations" dello University College Dublin.

Il Laboratorio è stato finanziato da un progetto della Science Foundation Ireland, SFI-PI Grant #08 IN.1-11869, che ha coinvolto i gruppi del Prof. Eckhard Spohr (University of Duisburg-Essen, GE), Eric Vande-Eijnden (Courant Institute, N.Y., U.S.A.), Baron Peters (University of California Santa Barbara, CA., U.S.A.), Ron Elber (University of Texas, U.S.A.), Niall English (UCD, Dublin, IE).

Dal Gennaio 2014: Visitor at CECAM.IRL, Nodo Irlandese del CECAM <https://www.cecarn.org/visitors.html>

13-27 Aprile 2013: University of Texas at Austin, ICES Center for Computational Life Sciences and Biology, presso il gruppo del Prof. Ron Elber

12-24 Marzo 2012: University of Texas at Austin, ICES Center for Computational Life Sciences and Biology, presso il gruppo del Prof. Ron Elber

12-26 Gennaio 2011: University of Texas at Austin, ICES Center for Computational Life Sciences and Biology, presso il gruppo del Prof. Ron Elber

6-11 Settembre 2010: University of Texas at Austin, ICES Center for Computational Life Sciences and Biology, presso il gruppo del Prof. Ron Elber

16-23 Novembre 2009: Courant Institute of Mathematical Sciences, NYU, presso il gruppo del Prof. Eric Vanden-Eijnden.

17-23 Maggio 2009: IMA-Institute for Mathematics and its applications, Minneapolis, Minnesota, nell'ambito del Programma "Mathematics and Chemistry";

18-29 Febbraio 2008: Esi-Erwin Schroedinger International Institute for Mathematical Physics, Vienna, nell'ambito del Programma "Metastability and rare events in complex systems".

Partecipazione a progetti di ricerca nazionali ed internazionali

Progetto INFM- Progetto Sud "Il Trealosio come agente stabilizzante di biostrutture", responsabile Prof. Lorenzo Cordone, 1998-2003

-Prin 2005 Proprietà Dinamiche Strutturali e Funzionali di Proteine in Sistemi Non-Liquidi Contenenti Acqua Residua: Accoppiamento con la Matrice Esterna, anni 2005-2007, responsabile locale e nazionale Prof. L. Cordone

-Prin 2008 Struttura-dinamica-funzione di biomolecole in sistemi lontani dall'idealità termodinamica, anni 2009-2011, responsabile locale e nazionale Prof. L. Cordone.

-Progetto su fondi di ateneo (ex 60%), "Struttura della Materia Biologica" (codice ORPA042212), responsabile Prof. A. Cupane, anni 2004, 2005,2006,2007,2008

-Progetto su fondi di ateneo, FFR 2012/2013, responsabile Dr. M. Levantino

-Collaboratore scientifico, workpackage "Biophysics: Molecular Dynamics study of the allosteric transition in Hemoglobin and ligand binding in Myoglobin", del progetto della Science Foundation of Ireland Project: SFI-PI Advanced Molecular Simulation: applications and methodological advances across biology, ICT and nano materials, and energy in the environment, SFI Grant No. 08-IN.1- 11869 sviluppato presso lo University College Dublin, anni 2009-2013, responsabile Prof. Giovanni Ciccotti

-Progetto di Supercalcolo CINECA/INFM 2005 n 432 "Molecular Dynamics simulations of carbonmonoxy-myoglobin in water-sugar systems", anno 2005, responsabile Prof. L. Cordone.

-PI2S2: Progetto per l'Implementazione e lo Sviluppo di una e-Infrastruttura in Sicilia basata sul paradigma della GRID, attività WP4/4.8: Definizione, progettazione e realizzazione del software necessario all'esecuzione delle applicazioni di Bio-Informatica su Grid, anni 2006-2008

-Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe C, presso CINECA, "Enhanced sampling of conformational space and reconstruction of free energy landscape of RNase A protein by Temperature-Accelerated Molecular Dynamics and Multiple Replica Repulsion Technique-ESCRNAS", 60000 ore nodo, Maggio 2014, responsabile Antonio Deiana

-Progetto di Supercalcolo PRACE- Partnership for Advanced Computing in Europe, tier-0, presso CINECA, "3DBULB", Marzo 2015-Marzo 2016, responsabile Michele Migliore, peer reviewed

-Progetto di Supercalcolo PRACE- Partnership for Advanced Computing in Europe, tier-0, presso CINECA, "SMOLER Synaptic Mechanisms underlying Odor Learning and Recognition", Marzo 2016-Maggio 2017, responsabile Michele Migliore, peer reviewed

-Progetto Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe B, presso il CINECA, "PUFRNAMD" Dicembre 2016-Dicembre 2017, responsabile Luca Maragliano, peer reviewed

-Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe C, presso CINECA, "HP10CFVHOK" Marzo 2016-marzo 2017, responsabile Letizia Chiodo

- Accesso continuativo alla quota ore nodo riservata a University College of Dublin presso centro di calcolo ICHEC, www.ichec.ie, Condominium Access, dal Gennaio 2010 ad oggi.

AMBITI DI RICERCA

Proprietà strutturali e dinamiche di acqua pura e soluzioni acquose, doppi strati lipidici, matrici di saccaridi; struttura-funzione-dinamica di proteine solubili e di membrana; interazione proteina solvente, interazione proteina-legante; interazione proteina/RNA. Sviluppo di force field per leganti; proprietà strutturali ed elettroniche di modelli di fotorecettori biologici.

L'attività di ricerca è condotta principalmente con approcci computazionali attraverso calcolo ad alte prestazioni (HPC): homology modelling, calcoli ab initio, simulazioni Monte Carlo e di Dinamica Molecolare di equilibrio e non equilibrio; metodi avanzati di campionamento in Dinamica Molecolare per lo studio di eventi rari; calcoli di energia libera; metodi di bioinformatica.

Responsabile del "Laboratorio di Biofisica Computazionale" presso il Dipartimento di Fisica e Chimica-Università di Palermo

Responsabile del laboratorio didattico di " Informatica applicata ai sistemi biologici", sito presso il Dipartimento di Fisica e Chimica-Università di Palermo

ALTRE ATTIVITA

Attività di revisore per:

Scientific Reports
Journal of Physical Chemistry
Journal of Physical Chemistry Letters

ACS Chemical Neuroscience

Phys Chem Chem Phys
Plos One
Chem Phys Letters
BBA - Bioenergetics
Journal of Molecular Graphics and Modelling
Process Biochemistry
Journal of Food Engineering

Attività organizzative/istituzionali/gestionali

E' responsabile del "Laboratorio di Biofisica Computazionale" DIFC-Palermo

E' responsabile del "Laboratorio di didattica: Informatica per i sistemi biologici" UNIPA

E' componente del collegio dei docenti della scuola di Dottorato in Tecnologie e Scienze per la salute dell'uomo.

E' stata componente del collegio dei docenti della scuola di Dottorato in Medicina Molecolare, curriculum in: Biofisica Molecolare e Bio-Imaging

E' stata componente del collegio dei docenti della scuola di Dottorato in Fisica

E' stata componente del Consiglio di Facoltà di Scienze MM. FF. NN dal 2004 ad oggi; negli anni 2006-2008 eletta come rappresentante dei ricercatori

E' stata componente della Commissione Consultiva del Senato Accademico per l'Area 02 Scienze Fisiche in qualità di rappresentante dei ricercatori, 2007-2009

E' componente della commissione didattica del DIFC;

E' stata componente della Commissione di Facoltà di Scienze MM. FF. NN: Carta dei Servizi agli studenti;

E' stata componente del Osservatorio per la didattica per il CCCS in Scienze Biologiche;

E' componente di commissione di Laurea triennale in Scienze Fisiche e Laurea magistrale in Fisica.

E' stata componente di commissione di Laurea in Scienze Biologiche V.O. e N.O.

E' stata componente di commissione per l'attribuzione di assegni di ricerca presso il Dipartimento di Scienze Fisiche ed Astronomiche, Università degli Studi di Palermo (2006,2008)

E' stata membro supplente della commissione giudicatrice per la valutazione dell'esame finale per il conseguimento del titolo di dottore di ricerca in INGEGNERIA FISICA XXI ciclo, Università di Catania, 2008

E' stata componente di commissione per le prove di accesso alla laurea triennale in Scienze Biologiche (A.A 2005/2006; 2006/2007; 2007/2008; 2008/2009).

E' stata componente di commissione per le prove di accesso alla laurea triennale in Scienze Fisiche, Università degli Studi di Palermo (A.A 2012/2013).

E' stata componente della commissione elettorale per le elezioni del Coordinatore del Consiglio Interclasse in Scienze Fisiche per il triennio 2013/2016

E' stata componente della commissione del CCCS in Scienze Biologiche per la Proposta di costituzione in rete tra la Facoltà di Scienze MM. FF. NN. dell'Università degli Studi di Palermo, il Liceo Scientifico Statale "Benedetto Croce" di Palermo e l'Educandato Statale Maria Adelaide di Palermo (Liceo Classico), per un progetto dal titolo: "La conoscenza delle leggi della natura per una cultura della legalità consapevole."

E' stata componente del comitato organizzatore locale del "XIII European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules", Palermo 28 Agosto-2 Settembre 2009.

E' stata componente del comitato organizzatore del "Five pieces and a do in computational physics, chemistry, biology, mathematics and engineering" Roma 18-20 Dicembre 2013 <http://www.phys.uniroma1.it/fisica/archivionotizie/five-pieces-and-do-computational>

E' stata componente del comitato organizzatore del "3rd Conference on Frontiers in Water Biophysics(FWB)" Erice 7-12 Settembre 2015, <http://www.waterbiophysics.eu/en/Home/Welcome-to-Frontiers-in-Water-Biophysics-2015/>

E' stata componente del comitato organizzatore del "Italian National Conference on Condensed Matter Physics, FISMAT2015", Palermo 28 Settembre-2 ottobre 2015 e responsabile scientifico delle tre sezioni parallele "Computational Biophysics I, II, III", <http://eventi.cnism.it/fismat2015>

E' stata componente del comitato organizzatore del "International Workshop on the Structure and Dynamics of Supercooled Water and Other Glassy Materials" Palermo 10-13 Ottobre 2015, <https://sites.google.com/site/chenunipa/>

Organizzatore dell'evento dimostrativo per le scuole "L'acqua: il solvente naturale e le sue proprietà uniche" nell'ambito della manifestazione "Esperienza Insegna", Palermo, 15 Febbraio, 2016.

E' stata componente del comitato organizzatore del "3rd Course of the ERICE School "NEUTRON SCIENCE AND INSTRUMENTATION" , 22-31 Luglio 2016, Erice (Italy)

E' componente del comitato organizzatore del "4rd Conference on Frontiers in Water Biophysics (FWB)" Erice 22-27 Maggio 2017
<http://www.waterbiophysics.eu/en/Home/Welcome-to-Frontiers-in-Water-Biophysics-2017/>

Organizzatore dell'evento dimostrativo per le scuole "L'acqua: il solvente naturale e le sue proprietà uniche" nell'ambito della manifestazione "Esperienza Insegna", Palermo, 15 Febbraio, 2017.

ALTRE ATTIVITÀ (scuole,corsi, altri workshops):

- Introduzione a Mathematica, Palermo, Area della Ricerca CNR, in collaborazione con Wolfram Research, 1991
- Formitt Course on Parallel Computing, Palermo, 18-22 Ottobre 1993
- Euroconference on "Computer Simulation in Condensed Matter Physics and Chemistry: Monte Carlo and Molecular Dynamics of Condensed Matter Systems", Como, Villa Olmo, 3-28 Luglio 1995
- Scuola Nazionale di Fisica della Materia, Torino, Villa Gualino, 8-19 Settembre 1996
- NATO ASI School on "Hydration Processes in Biology: Theoretical and Experimental Approaches", Les Houches, 4-15 Maggio 1998
- VI Regional Crrnsm Conference Palermo, Italy 14-15 October 1999
- CECAM tutorial on "Car-Parrinello Molecular Dynamics", Lione, 11-15 Settembre 2000
- LXXXVI Congresso Nazionale Della Società Italiana Di Fisica Palermo, 6-11 Ottobre 2000
- Scuola "High Performance Computing", Osservatorio Astronomico di Palermo "G.S. Vaiana", Palermo, 29 Maggio-1 Giugno 2001
- CECAM tutorial on "New Algorithms for Molecular Dynamics sampling methods", Lione, 5-8 Giugno 2001
- Scuola di Biofisica della Società Italiana di Biofisica Pura ed Applicata (SIBPA) "Interaction between Macromolecules and Solvent: Simulation and Experimental Approaches", Venezia, 28 Gennaio-1 Febbraio 2002
- Ciclo di lezioni su "Milestoning Methods", Prof. Ron Elber, CECAM, Lione (FR) 25-28 Agosto 2003
- Ciclo di lezioni su "Advanced sampling Methods", Prof. Eric Vanden Ejinden, 17-21 Maggio 2004, Università di Roma -La Sapienza
- Computer Simulations in Condensed Matter: From Materials to Chemical Biology, Erice, Luglio 21-30, 2005
- XVIII Congresso della Società Italiana di Biofisica Pura e Applicata-SIBPA, Palermo, September 2006
- Metastability and Rare Events in Complex Systems, ESI-Erwin Schroedinger International Institute for Mathematical Physics , Vienna (AU) 18-23 febbraio 2008
- Progress in simulating activated processes", Valle Capore (Rome, IT), 26-30 May 2008
- UDA-GPGPU programming, ICHEC-UCD CASL, 6-7 Dicembre 2011, Dublino (IR)
- Ciclo di Lezioni su "Probability, statistical mechanics models and applications. The inverse problem", Prof. Pierluigi Contucci, Università di Bologna, Luglio 11-15 2011, Dublino (IR)
- CECAM workshop on "Molecular Simulation in External Electric and Electromagnetic Fields", May 19, 2011 to May 21, 2011
- CECAM workshop on "Advanced Simulation/Modelling in Food",University College Dublin, Ireland December 4, 2014 - December 5, 2014