

## INFORMAZIONI PERSONALI MARIA CRISTINA MENZIANI

-  Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, via Campi 103, 41125 Modena (Italy)
-  +39 059 2058555
-  [mariacristina.menziani@unimore.it](mailto:mariacristina.menziani@unimore.it)
-  <http://personale.unimore.it/Rubrica/Dettaglio/menziani>

POSIZIONE RICOPERTA Professore Ordinario (Chimica Fisica, CHIM/02 Settore Concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per Le Scienze Chimiche)

## ESPERIENZA PROFESSIONALE

Da 01/11/2002 a 07/11/2016  
Da 16/06/1992 a 01/11/2002)

- Professore Associato, Chimica Fisica (CHIM/02), Università degli Studi di MODENA e REGGIO E.  
Ricercatore Universitario, Chimica Fisica (CHIM/02) Università degli Studi di MODENA
- Vice-direttore del dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche 2019-2021
  - Membro della Commissione Risorse e Sviluppo del Dipartimento DSCG dal 2011
  - Membro del Collegio dei Docenti del Corso di Dottorato "Models and Methods for Material and Environmental Sciences" dal 2014 (XXIX ciclo)
  - Membro del Collegio dei Docenti del Corso di Dottorato "Models and Methods for Material and Environmental Sciences" dal 2014 (XXIX)
  - Visiting Professor presso Interdisciplinary Department on Molecular Systems and Materials of the IRAMIS Institute at the Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA) in Saclay, France (2013).
  - Research fellow presso il Physical Chemistry Laboratory, Oxford University (U.K.) (ottobre 1987-ottobre 1988, Febbraio-Maggio 1989).

## ISTRUZIONE E FORMAZIONE

- Laurea in Chimica presso l' Università degli Studi di Modena (22-07-1983)
- Dottore di ricerca in Scienze Chimiche (1988)

## Competenze organizzative e gestionali

- Presidente della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica italiana (triennio 2020-2022).
- Direttore della Scuola di Dottorato in "Modellistica, simulazione computazionale e caratterizzazione multiscala per le scienze dei materiali e della vita." dal 2006 al 2013. (XXI-XXVIII)
- Direttore Associato del Centro virtuale per la progettazione di farmaci assistita da computer, finanziato dalla National Foundation for Cancer Research (USA) e dedicato allo sviluppo e applicazione di metodi per la progettazione di nuovi agenti farmaceutici (2000 - 2005)
- Coordinatore Unità del Centro di Eccellenza Europeo "Regional Centre of Excellence in New Functional Materials, their Design, Diagnostics and Exploitation" sede Institute of Physics, University of Tartu, Estonia (2001-2005)

**Competenze professionali di interesse specifico per la partecipazione al bando**

- Dal 2015 è inserita nell'Albo ANVUR degli **Esperti Disciplinari della valutazione**, <http://www.anvur.it/attachments/article/475/Albo%20Esperti%20Disciplinari~.pdf>.
  - Membro del **Nucleo di Valutazione di UNIMORE dal 2017**.
  - Membro del **Presidio di Qualità di Ateneo UNIMORE dal 2013 al 2016**.  
L'attività svolta ha guidato l'Ateneo nel percorso di preparazione all'accREDITAMENTO della sede e dei corsi di studio da parte dell'Agenzia Nazionale di Valutazione del Sistema Universitario e della Ricerca (ANVUR). La valutazione si è conclusa con esito positivo.  
[http://www.anvur.it/index.php?option=com\\_content&view=article&id=898&Itemid=643&lang=it](http://www.anvur.it/index.php?option=com_content&view=article&id=898&Itemid=643&lang=it)
  - **Rappresentante di area 03 – Scienze chimiche nel Consiglio Universitario Nazionale dal 2007-2010**.
    - Ha svolto funzione di segretaria della "Commissione CUN - Programmazione e Finanziamenti" dove ha contribuito a formulare analisi critiche sull'impatto delle policies nazionali sul sistema universitario e sulle soluzioni adottate in risposta dalle singole università.
    - Ha partecipato attivamente alla "Commissione CUN – Didattica" dove ha approfondito la conoscenza del quadro normativo riguardante la transizione da DM 509 a DM 270, contribuendo a 1) evidenziare i problemi emersi; 2) formulare linee guida per la predisposizione degli ordinamenti e criteri per la loro valutazione; 3) valutare gli ordinamenti stessi, esaminandoli sotto il profilo della qualità, coerenza interna e inquadramento nel complesso del Sistema universitario nazionale.
    - Ha collaborato ai lavori della "Commissione CUN – Ricerca e valutazione" per la formulazione di criteri trasparenti e rigorosi per la valutazione dell'attività scientifica.
- Svolge continuativamente **attività di valutazione di progetti di ricerca** per Academy of Finland, Wellcom Trust (U.K.), Medical Research Council (U.K.), Scuola Normale Superiore di Pisa, Agence Nationale de la Recherche (Fr). Valutatore di progetti PRIN, FIRB, SIR e VQR, European PRACE e ERC proposals.
- Membro dell' ERC Advanced Grant Expert Panel (PE4) 2016-2019.

**Altre competenze**

- Membro eletto del Direttivo della Divisione di Chimica teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana dal 2017 al 2019.
- Componente del Comitato Scientifico del Workshop "Avogadro Colloquia, Roma, 22 Maggio 2015 [https://www.soc.chim.it/it/news/avogadro\\_colloquia2015](https://www.soc.chim.it/it/news/avogadro_colloquia2015)
- Componente della Commissione Scientifica della Società Chimica Italiana dal 2014
- Componente del Comitato Scientifico del Workshop "Winter Modelling", Modena, 13-14 Marzo 2014
- Componente del Comitato Scientifico dei Congressi della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica dal 2000 al 2006.
- Organizzatore della Scuola Nazionale in Simulazioni Computazionali Multiscala applicate alle Scienze dei Materiali (2003 - 2005) promossa dalla Divisione di Chimica Fisica della SCI.
- Membro della Biophysical Society, Molecular Graphycs and Modelling Society, Divisione di Chimica Fisica, Divisione di Chimica Computazionale della Società Chimica Italiana, Consorzio INSTM.
- Segretaria della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana (2004-2006).
- Membro (co-optato prima e in seguito eletto) del Direttivo della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana (2000-2003)

**Premi**

- Medaglia Bonino 2014", riconoscimento che la Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana conferisce, annualmente, a un Professore di Chimica Fisica che si sia distinto per l'eccellenza della sua produzione scientifica e per la competenza, efficacia e generosità del suo impegno nella promozione del ruolo delle Discipline Chimico Fisiche.
- 2001 Italgas Prize for Research and Technological Innovation – Il premio è stato consegnato al Prof. W. Graham Richards come riconoscimento del lavoro svolto da un team internazionale di 4 ricercatori di cui ho fatto parte.

**ULTERIORI INFORMAZIONI**

## Interessi di ricerca

- L'attività di ricerca è principalmente rivolta allo sviluppo di strategie computazionali integrate (metodi classici/quantistici/statistici) per la razionalizzazione ed interpretazione, di dati sperimentali riguardanti materiali inorganici, cristalli molecolari organici, nanomateriali, proteine e molecole organiche di interesse biologico e farmacologico. Molti progetti sono svolti in collaborazione con gruppi sperimentali. Particolare enfasi è data alla progettazione di nuovi materiali e di potenziali leader farmacologici.
  - ✓ Computer simulations and modelling of condensed matter, chemical and biophysical systems:
  - ✓ Drug & Material Design
  - ✓ Molecular dynamics (classical & CP)
  - ✓ Molecular Simulation Protocols and computational tools for analysis
  - ✓ Computational spectroscopy: UV-vis, IR, Raman, solid state NMR parameters and NMR spectra simulations.
  - ✓ Quantitative Structure-Activity Relationships
- Attualmente coordina un gruppo di ricerca formato da 1 PA, 1 PhD, 2 dottorandi.
- Autore di più di 170 pubblicazioni ISI su riviste internazionali, 5 capitoli di libri, 7 contributi su volume con ISBN. Ha ricevuto più di 4400 citazioni totali, con una media di citazioni per anno, negli ultimi 10 anni, superiore a 200; h-index 38 (fonte Scopus, Dicembre 2020).
- List of Publications
- <http://www.researcherid.com/rid/H-2585-2012>
- <http://orcid.org/0000-0003-3428-5297>

## Attività Didattica

- Chimica Computazionale per il corso di Laurea Specialistica/Magistrale in Chimica: A.A. 1996/97 ad oggi.
- Chimica Fisica e Spettroscopia molecolare (Modulo B) per il corso di Laurea Magistrale in Chimica: A.A. 2014/15 ad oggi.
- Chimica dei Sistemi Complessi per il corso di Laurea Magistrale in Chimica: A.A. 2013/2014
- Modellazione Atomistica B con laboratorio per il corso di Laurea Specialistica in Progettazione e sviluppo di nuovi Materiali (Interfacoltà Scienze- Ingegneria): A.A. 2004/2005 al 2009/2010
- Modellazione Atomistica A con laboratorio per il corso di Laurea Specialistica in Progettazione e sviluppo di nuovi Materiali (Interfacoltà Scienze- Ingegneria): da A.A. 2005/2006 al 2006/2007
- Informatica Chimica per il corso di Laurea triennale in Chimica: A.A. 2002/2003 al 2009/2010
- Informatica Chimica per il corso di Laurea triennale in Informatica: A.A. 2006/2007 al 2008/2009
- Bioinformatica per il corso di Laurea triennale in Biotecnologie: da A.A. 2002/2003 al 2004/2005.
- Laboratorio di Chimica fisica II (modulo) per il corso di Laurea in Chimica: A.A 2000/2001

## Finanziamenti competitivi

Principal Investigator FAR2015, Rational design of curcumin-based bifunctional ligands for early diagnosis and therapy of Alzheimer's disease (80.000 euro, 18 mesi) Bando UNIMORE su base competitiva.

Principal Investigator del progetto 2010PA3244 Insight into Silver Nanocube-protein interactions by computational simulations finanziato con 150.000 core-hours da PRACE Preparatory Access da utilizzarsi sul supercalcolatore Fermi, CINECA, Italy e Marenostrum, BSC, Spain

Coordinatore Unità Locale PRIN2010-2011, Prot. 2010C4R8M8\_002 coordinatore nazionale Prof. A. Agostiano, UniBa, "Organizzazione Funzionale a Livello Nanoscopico di (Bio)Molecole e Ibridi per Applicazioni nel Campo della Sensoristica, della medicina e delle Biotecnologie". (88000 euro, 36 mesi)

Coordinatore Locale Progetto Regionale Emilia Romagna SPINNER 2013 per i dottorati di Ricerca. Titolo del progetto: 'Ottimizzazione delle forme cristalline di farmaci in relazione all'attività, la biodisponibilità, brevettabilità e alla progettazione di polimorfi solvatati e co-cristalli con metodi a basso impatto ambientale'. (45.000, 36 mesi)

Coordinatore Unità Locale PRIN2008, Prot. 2008J9RNB3 coordinatore nazionale Prof. A. Polimeno, UniPd, "Time Integration for Molecular Evolution". (32.180 euro, 24 mesi)

Coordinatore Unità Locale PRIN 2006, Prot. 2006033728\_003, coordinatore nazionale Prof. Delia Picone, UniNa: Strategie computazionali integrate per l'interpretazione di proprietà strutturali e dinamiche di sistemi nanostrutturali tramite sonde spettroscopicamente attive. (43.000 euro, 24 mesi)

Progetto FIRB 2012 Protocollo: RBFR1248UI "Nuove Strategie Teorico / Computazionali Multiscala per la Progettazione di Composti Ibridi Organico -Inorganici Foto e Termo Responsivi per Circuiti Nanoelettronici." responsabile Nazionale Mirco Zerbetto, responsabile locale Alfonso Pedone.

Progetto bilaterale Galileo finanziato dall'università italo francese per la mobilità di giovani ricercatori, 2013. Titolo del progetto: Investigation of Mo-99 environment in Nuclear Waste Glasses: A synergic computational and experimental approach. (durata del progetto: 1 anno) responsabile locale Alfonso Pedone (Progetto finanziato)

Partecipante al Programma di Ricerca Prin 2003 protocollo n. 2003035772\_004 "Termodinamica del processo redox in metalloproteine di trasporto elettronico e metalloenzimi" responsabile Nazionale Ivano Bertini, responsabile locale Marco Sola

Partecipante al Programma di Ricerca Prin 2001 protocollo n. 2001031717\_004 "Simulazione computazionale ed analisi comparativa della struttura dinamica di peptidi e proteine amiloidogeniche." responsabile Nazionale Carlo Pedone, responsabile locale P.G. De Benedetti.

Responsabile di Contratti di Ricerca annuali rinnovabili con Rottapharm spa per una ricerca su "Nuovi agenti farmacologici modulatori dell'attività della cascata delle MAPK sia "inibitori della metalloproteasi ADAMTS-5, Aggrecanasi" dal 2006 al 2008. (50000 euro)

Responsabile di Contratti di Ricerca con Helsinn Healthcare S.A. per una ricerca su: "Computational studies on the interaction of the 5HT3 receptor with palonosetron: unrevealing determinants for drug action" dal 2006-2007 (15000 euro).

Responsabile del Finanziamento 2008 della Fondazione Cassa di Risparmio di Modena per l'attivazione di un assegno di ricerca annuale

Responsabile del finanziamento dalla National Foundation for Cancer Research (USA) per il Centro virtuale per la progettazione di farmaci assistita da computer dal 2000 al 2005 (\$150,000).

**Altri Finanziamenti**

- Responsabile di Contratti di Ricerca annuali rinnovabili con Rottapharm spa per una ricerca su "Nuovi agenti farmacologici modulatori dell'attività della cascata delle MAPK sia "inibitori della metalloproteasi ADAMTS-5, Aggrecanasi" dal 2006 al 2008. (50000 euro)
- Responsabile di Contratti di Ricerca con Helsinn Healthcare S.A. per una ricerca su: "Computational studies on the interaction of the 5HT3 receptor with palonosetron: unrevealing determinants for drug action" dal 2006-2007 (15000 euro).
- Responsabile del Finanziamento 2008 della Fondazione Cassa di Risparmio di Modena per l'attivazione di un assegno di ricerca annuale
- Responsabile del finanziamento dalla National Foundation for Cancer Research (USA) per il Centro virtuale per la progettazione di farmaci assistita da computer dal 2000 al 2005 (\$150,000).

## COMPETENZE PERSONALI

Lingua madre Italiano

Altre lingue	COMPRESIONE		PARLATO		PRODUZIONE SCRITTA
	Ascolto	Lettura	Interazione	Produzione orale	
Inglese	C1	C1	C1	C1	C1
Francese	A1	A1	A1	A1	A1

Modena, 03 Dicembre 2020