

Curriculum Vitae

Il Dott. Rocco Caliandro si è **laureato in Fisica** presso l'Università degli Studi di Bari nel 1993 (votazione 110/100, relatore Prof. B. Ghidini). Dopo un anno di **servizio militare** svolto presso il Nucleo Elaborazione Dati della Marina Militare di Taranto, nel 1995 è stato assegnista con borsa di studio post-laurea (bando n.201.19.1 del 30/11/94) presso **l'Istituto per la Ricerca e lo Sviluppo delle Metodologie Cristallografiche del Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR)** (in pratica l'Istituto che è poi diventato Istituto di Cristallografia), sotto la guida del Prof. C. Giacovazzo. Nel 1996 ha iniziato il corso di dottorato di ricerca (XI ciclo) presso il Dipartimento Interateneo di Fisica dell'Università degli Studi di Bari. Nel 1999 ha conseguito il **Dottorato in Fisica (XI ciclo)** presso il Dipartimento Interateneo di Fisica dell'Università degli Studi di Bari, discutendo una tesi dal titolo "Produzione di particelle strane in interazioni piombo-piombo e protone-piombo a 160 GeV/c per nucleone", relatore: Prof. B. Ghidini. Ha proseguito le sue ricerche nella Fisica delle Alte Energie durante la sua **permanenza al CERN** da febbraio a maggio 1999, durante una **borsa di studio post-dottorato biennale** per fisici sperimentali (bando n.7197 del 14/6/1998) **dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN)** e durante un **assegno di ricerca universitario** (D.R. n.11042 del 20/12/2000), dal titolo "Ricerca del Plasma di Quark e Gluoni", svolto presso il Dipartimento Interateneo di Fisica dell'Università di Bari dal 1 giugno 2001 al 27 dicembre 2001. Il 28 dicembre 2001 è stato assunto dal **CNR** come **ricercatore a tempo indeterminato presso l'Istituto di Cristallografia**. A luglio 2018 è risultato idoneo nel concorso pubblico per titoli e colloquio bando 367.171 - area strategica "Biomolecole e Biomateriali per la salute" ed è stato assunto dal CNR con profilo **Primo Ricercatore** II livello professionale ad ottobre del 2020. A febbraio 2025 è risultato vincitore della procedura selettiva per soli titoli bando 315.62 DR - "Chimica e Materiali per la Salute e le Scienze della Vita", classificandosi al terzo posto in graduatoria. A decorrere da gennaio 2023 gli è stato attribuito il profilo di **Dirigente di Ricerca** I livello professionale. E' stato nominato nella **terna degli idonei alla direzione dell'Istituto di Cristallografia** del CNR (prot. n 0074743 del 23/11/2020- bando n.390.365). e ha sostenuto l'**audizione da parte del Consiglio di Amministrazione del CNR** il giorno 27 Maggio 2021.

Percorso scientifico:

La sua ricerca ha una forte connotazione **interdisciplinare** ed ha toccato quasi tutte le **aree tematiche che caratterizzano l'Istituto di Cristallografia**, come testimoniato dalla lista delle pubblicazioni.

Sviluppo di metodologie cristallografiche innovative, teoriche, computazionali e sperimentali, e loro applicazioni per lo studio della materia cristallina e non-cristallina attraverso raggi X, elettroni e neutroni.

Si è occupato dello sviluppo di metodologie cristallografiche per la determinazione della struttura atomica di composti cristallini utilizzando dati da diffrazione di raggi X. I dati raccolti contengono unicamente informazione sull'intensità dei raggi X diffratti, ma per ricostruire la struttura cristallina è necessario conoscere anche la loro fase. Tale informazione può essere recuperata utilizzando complesse metodologie matematiche, detti metodi di fase. Il Dott. Caliandro si è dapprima occupato della soluzione di composti organici utilizzando dati di diffrazione di raggi X da polveri di microcristalli. In questo settore i suoi principali contributi sono stati: i) sviluppo di un metodo Monte Carlo per posizionare nella cella cristallina un modello molecolare flessibile; ii) sviluppo di una strategia combinatoria per migliorare l'estrazione delle intensità dei singoli riflessi a partire dal profilo sperimentale. In seguito si è occupato della soluzione strutturale di macromolecole biologiche. I suoi principali contributi sono stati:

sviluppo di un metodo di deconvoluzione Patterson per la soluzione strutturale ab initio di proteine, che si è dimostrato alternativo e più efficiente del classico approccio dei Metodi Diretti. Questo metodo ha consentito di portare i limiti per la soluzione ab initio fino ad oltre i 6000 atomi non idrogeno nell'unità asimmetrica.

sviluppo di un algoritmo che consente di estendere la risoluzione sperimentale, estrapolando i moduli e le fasi dei riflessi non misurati. Ciò ha permesso di ottenere mappe di densità elettronica con dettaglio

atomico anche quando i dati sperimentali hanno una risoluzione fino a 2.0 Å e di incrementare l'efficienza della procedura di fase.

implementazione di un nuovo programma di Molecular replacement, chiamato REMO, che è in grado di competere con i migliori programmi esistenti.

sviluppo di un algoritmo più efficiente per completare un modello strutturale utilizzando lo strumento della sintesi di Fourier differenziale.

Sto applicando l'AI alle tecniche di fase, per facilitare la soluzione ab initio di strutture cristalline.

Sviluppo di strumentazione, metodiche e set-up dedicati per applicazioni sperimentali dello scattering di raggi X da sorgenti convenzionali, della luce di sincrotrone e di neutroni.

Si è occupato della progettazione, della calibrazione, del monitoraggio e della simulazione dei rivelatori a pixel di silicio usati per la ricostruzione delle tracce delle particelle cariche che attraversano l'apparato sperimentale, e di un rivelatore a radiazione di transizione per la selezione di particelle di alta energia. Si noti che i rivelatori a pixel di silicio, utilizzati per la prima volta in questi esperimenti, hanno poi trovato larga applicazione presso le sorgenti di luce di sincrotrone per la rivelazione di fotoni in esperimenti di Cristallografia.

Studi strutturali e microstrutturali di nanomateriali e biomateriali di interesse scientifico e tecnologico.

Si è occupato dello studio delle proprietà strutturali statiche e dinamiche di micro- e nano-materiali attraverso l'utilizzo di tecniche computazionali avanzate, quali il calcolo Pair Distribution Function, in grado di fornire informazioni sull'ordine strutturale a corto range, e la tecnica della Modulation Enhanced Diffraction, in grado di estrarre il contributo degli atomi che rispondono a stimoli esercitati sul campione durante l'esperimento di diffrazione a raggi X. In questo contesto ha utilizzato gli strumenti di calcolo sviluppati per l'analisi dei dati degli esperimenti di Fisica delle alte energie. Sto applicando queste tecniche per la caratterizzazione statica e dinamica di materiali per l'energia.

Sintesi e studio delle relazioni struttura-attività-funzione di composti inorganici, organici, bioinorganici e farmaceutici.

Ha utilizzato e sviluppato di tecniche di modellistica computazionale per la simulazione della funzionalità di proteine. Le strutture proteiche determinate sperimentalmente costituiscono il punto di partenza per simulazioni condotte con i metodi della dinamica molecolare, finalizzate a studiare il loro comportamento in funzione del tempo. Inoltre la struttura di macromolecole biologiche non ancora risolte è predetta per mezzo della modellistica computazionale. Tali tecniche sono state utilizzate per studiare le caratteristiche strutturali di nuovi enzimi estratti da foglie di carciofo, di interesse per la bioremediation, e i meccanismi strutturali coinvolti nell'insorgenza di patologie neurodegenerative e trombotiche, attraverso la simulazione delle instabilità introdotte da mutazioni osservate rispettivamente nella proteina prione e nella proteina Z.

Progettazione su basi molecolari, sintesi, produzione, cristallizzazione e caratterizzazione strutturale e funzionale di biomolecole, in fase solida o liquida, anche in interazione con ligandi e/o metalli, per applicazioni biotecnologiche e/o farmaceutiche.

Si è occupato della determinazione della struttura di macromolecole biologiche attraverso tecniche cristallografiche. Tale attività sperimentale prevede la cristallizzazione delle proteine, la presa dati al sincrotrone e l'utilizzo di programmi di calcolo per la risoluzione strutturale. Essa è stata applicata a proteine e addotti proteina-ligando di interesse farmaceutico e biotecnologico. Sto applicando le tecniche di biologia strutturale alla lotta ai patogeni delle piante e degli animali, seguendo un approccio OneHealth.

Studi di processi e prodotti di interesse biotecnologico.

Ha sviluppato processi innovativi per la cristallizzazione di proteine, basati sull'utilizzo di membrane e idrogeli, che possono essere impiegati in processi industriali di purificazione, o come strumento per immobilizzare enzimi a fini biotecnologici. Sta sviluppando membrane biologiche in grado di mantenere catalizzatori enzimatici in forma cristallina in condizioni operative.

Fisica delle alte energie

L'attività di ricerca ha riguardato lo studio delle collisioni tra nuclei pesanti ad energie ultra-relativistiche, alla ricerca di evidenze sperimentali dell'esistenza dello stato di Plasma di Quark e Gluoni (QGP) ipotizzato per la materia nucleare ad alta densità e temperatura. L'attività è stata focalizzata sullo studio delle particelle strane prodotte in tali collisioni. Nel caso in cui abbia luogo una transizione di fase della materia nucleare verso lo stato di QGP, la produzione di particelle strane e multi-strane in reazioni tra nuclei è prevista essere notevolmente incrementata rispetto a quella in interazioni del tipo nucleone-nucleone. Ha partecipato agli esperimenti WA85, WA97, NA57 e ALICE, condotti presso l'Organizzazione Europea per la Ricerca Nucleare (CERN) di Ginevra da Collaborazioni tra fisici italiani e stranieri. L'attività di ricerca ha richiesto frequenti trasferte al CERN per partecipare all'installazione degli apparati sperimentali, alle sessioni di presa dati e alle sessioni di analisi dati, e per esporre i risultati raggiunti al resto della Collaborazione.

Attività progettuale:

Responsabile di progetto:

- 2025-2028 Progetto di ricerca “Novel integrated approaches for brucellosis prevention, control and eradication using brucellin- derived tools in production animals (BRU-CELL-IN)” finanziato dall'European Partnership on Animal Health and Welfare (EUPAHW). Ruolo di responsabile dell'unità dell'Istituto di Cristallografia. Importo finanziamento per l'unità operativa: 299.250 €
- 2023-2026 Progetto di ricerca “Research actions for reducing the impact on agricultural and natural ecosystems of the harmful plant pathogen Xylella fastidiosa (REACH-XY)” soggetto attuatore CNR su finanziamento dal Ministero dell'Economia, legge 30 dicembre 2021, n. 234 - Bilancio di previsione dello Stato per l'anno finanziario 2022 e bilancio pluriennale per il triennio 2022-2024 - art. 1, comma 325 per sostenere le attività di ricerca svolte dal CNR per il contenimento della Xylella fastidiosa. Ruolo di responsabile dell'unità dell'Istituto di Cristallografia e responsabile (PI) delle attività del sottoprogetto D: “Innovative biological treatments and rational drug discovery approaches to control bacterial infections”. Importo finanziamento per l'unità operativa: 484.748 €
- 2023-2025 Progetto di ricerca “Biocatalytic units based on enzyme Crystals for efficient Continuous CO2 Conversion to formate - Bio4C”, progetto di ricerca di rilevanza nazionale (PRIN) 2022 PNRR del Ministero dell'Università e della Ricerca italiano (Codice progetto: P2022LYYWK). Ruolo di Principal Investigator. Importo finanziamento per l'intero progetto: 239.643 €.
- 2023-2025 Progetto di ricerca “MENDELEEV – green revolution by Merging mEtal–orgaNic frameworks with Deep Eutectic soLvEnts for the dEvelopment of sustainable technologies and artificial nitrogen fixation”, progetto di ricerca di rilevanza nazionale (PRIN) 2022 del Ministero dell'Università e della Ricerca italiano (Codice progetto: 2022KMS84P). Ruolo di responsabile dell'unità CNR. Importo finanziamento per l'unità operativa: 112.365 €.
- 2021-2023 Progetto di ricerca “Sviluppo di alimenti funzionali per l'innovazione dei prodotti alimentari di tradizione italiana (ALIFUN)”, progetto PON del Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca italiano in risposta all'avviso per la presentazione di progetti di ricerca industriale e sviluppo sperimentale nelle 12 Aree di specializzazione individuate dal PNR 2015-2020. Codice progetto ARS01_00783. Ruolo di responsabile dell'unità CNR. Importo finanziamento per l'unità operativa: 46.000 €.
- 2019-2022 Progetto di ricerca “The inorganic side of lysosome cell biology: the network of metal-protein interactions - ICHEMFLY”, progetto di ricerca di National Relevance (PRIN) 2017 del Ministero

dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca italiano (Codice progetto: 2017WBZFHL_006). Ruolo di responsabile dell'unità CNR. Importo finanziamento: 116.000 €.

- 2016-2020 Progetto "Revolutionising Downstream Processing of Monoclonal Antibodies by Continuous Template-Assisted Membrane Crystallization - AMECRYST" del programma HORIZON 2020-FETOPEN-2014-2015-RIA (grant agreement n. 712965). Ruolo di responsabile dell'unità CNR e coordinatore delle attività del work task 5.3, intitolato "Structural, morphological & biological characterizations". Importo finanziamento: 200.674 €.
- 2015-2017 Progetto di collaborazione "Static and dynamic crystallographic investigations for developing specific and selective inhibitors for the epigenetic therapy of cancers", finanziato nell'ambito dell'accordo di cooperazione scientifica tra il CNR e la National Research Foundation della Corea del Sud. Ruolo di responsabile delle attività italiane. Importo finanziamento: 20.000 €.
- 2013-2015 Progetto "Promozione di Processi ECO_sostenibili per la valorizzazione delle Produzioni agroalimentari Pugliesi - ECO_P4" del Programma Operativo Nazionale per la Ricerca e la Competitività 2007-2013 (n. 713 / Ric. Del 29/10/2010). Responsabile dell'unità CNR. Importo finanziamento: 40.751 €.
- 2014-2016 Progetto di collaborazione "New algorithms for protein dynamics studies and their applications to protein crystallography", finanziato nell'ambito dell'accordo di cooperazione scientifica tra il CNR e l'Accademia Polacca delle Scienze (PAS). Ruolo di responsabile delle attività italiane. . Importo finanziamento: copertura delle spese di viaggio e soggiorno in Polonia dei ricercatori CNR e in Italia dei ricercatori PAS.
- 2014-2014 Attività scientifica "Analisi XRD su campioni di foglie di vite liofilizzate", condotta nell'ambito di un contratto di consulenza tra il Dipartimento di Ingegneria Civile, Ambientale, Territoriale, Architettura e Chimica del Politecnico di Bari e l'Istituto di Cristallografia del CNR, prot. CNR 5059 del 27/11/2013. Ruolo di responsabile delle attività. Importo finanziamento: 6.710 €.
- 2010-2010 Attività scientifica "Caratterizzazione strutturale di marcatori molecolari luminescenti" condotta nell'ambito di un contratto di consulenza tra l'azienda Meditekology S.r.l. di Lecce e l'Istituto di Cristallografia del CNR, prot. CNR n.1359 del 20/09/2010. Ruolo di responsabile delle attività. Importo finanziamento: 25.000 €.

Progetti di ricerca interni al CNR

- 2021-oggi Progetto autofinanziato CNR DCM.AD007.265 "Cristallografia e modellistica computazionale per l'indagine strutturale di macromolecole biologiche". Ruolo di responsabile del progetto.
- 2012-2020 Sottoprogetto CNR DCM.AD003.001.002 "Applicazione di tecniche cristallografiche e modellistica computazionale per studi strutturali di biomolecole". Il sottoprogetto afferisce al progetto dal titolo "Progettazione di nuove molecole con specifiche proprietà biochimiche" del Dipartimento di Scienze Chimiche e Tecnologie dei Materiali. Ruolo di responsabile del sottoprogetto.
- 2009-2011 Commessa CNR PM.P07.011 "Sviluppo e applicazione di metodologie computazionali per la determinazione strutturale di biomolecole". La commessa afferiva al progetto PM.P07 dal titolo "Modelling predittivo delle funzionalità in sistemi nanostrutturati di interesse biologico e tecnologico" del Dipartimento di Progettazione Molecolare. Ruolo di responsabile della commessa.

Progetti per ore di calcolo:

- 2022 Progetto "Identification of antagonists of gliadin peptides", approvato dal CINECA, bando HPC@CINECA nell'ambito dell'infrastruttura ELIXIR-IIB. Ruolo di responsabile del progetto.
- 2009 Progetto "Crystal structure solution by iterative modeling", approvato dal CASPUR - Consorzio interuniversitario per applicazioni di supercomputer per università e ricerca, bando Standard HPC Grant 2009. Ruolo di responsabile del progetto.

2008 progetto "Crystallographic Computing", approvato dal CASPUR - Consorzio interuniversitario per applicazioni di supercomputer per università e ricerca, bando DMP @ CASPUR 2008. Ruolo di responsabile del progetto.

Partecipazione a progetti di ricerca:

2025-2026 Progetto bilaterale con la Royal Society dal titolo "PEPSIZE – From short to medium bioactive PEPTIDE SIZE: new insights into crystallization and structure determination" finanziato nell'ambito dell'accordo di cooperazione scientifica tra il CNR e la Royal Society. Responsabile Dr. B. Carrozzini.

2023-2024 Progetto "Produzione in scala di nanocristalli di calcoalogenuri metallici - MEX-UP", finanziato con 80.000 € nell'ambito del Programma di Applicazione, Miglioramento e Costruzione dei trovati brevettati (AMICO) 2a edizione - Bando per il sostegno a Progetti di Proof-of-Concept (PoC) PNRR 2022. (<https://www.cnr.it/it/bando-uvr-amico-poc-2022>). Responsabile Dr. C. Giansante.

2022-2025 Accordo di programma per la regolamentazione dei rapporti in relazione allo svolgimento di attività di ricerca nell'ambito del piano nazionale di ripresa e resilienza (PNRR) - missione 2 "rivoluzione verde e transizione ecologica" – componente 2 "energia rinnovabile, idrogeno, rete e mobilità sostenibile" – investimento 3.5 "ricerca e sviluppo sull'idrogeno" – AdC ENEA-CNR (CUP B93C22000630006). Responsabile Dr.ssa C. Giannini.

2021-2023 Progetto bilaterale con la Royal Society dal titolo "Bioremediation of aflatoxins by DypB: towards a full understanding of the reaction mechanism by time-resolved structural investigations" finanziato nell'ambito del bando International Exchanges 2020 Cost Share. Responsabile Dr. B.D. Belviso.

2017-2021 Horizon 2020– PON 2014/2020 progetto MISE D.M. 1/06/2016 intitolato "Studio, progettazione e sviluppo di un kit innovativo per la diagnosi precoce e non invasiva della celiachia mediante marcatori genetici". Responsabile: Dott. M. Saviano.

2012-2015 Progetto relativo al bando "Sviluppo del Capitale Umano ad Alta Qualificazione 2011" della Fondazione CON IL SUD, intitolato "Verso la medicina personalizzata: sviluppo di nuove molecole selettive per il trattamento del neuroblastoma". Responsabile: Dott. M. Saviano.

2013-2014 Progetto "Collezione di Composti Chimici ed attività di Screening (CCCSN), coordinato dal CNR attraverso il Dipartimento di Scienze Biomediche. Responsabile: Dott. M. Saviano.

2007-2010 Progetto PRIN 2007 prot. n. 200755ZKR3_005 intitolato "Applicazioni delle tecniche MAD e Sviluppo di nuovi algoritmi di calcolo per migliorare il processo di risoluzione delle strutture cristalline attraverso i dati di diffrazione da polveri". Responsabile: Prof. C. Giacovazzo.

2004-2008 progetto MIUR rif. N.97, D.M. 1105 9/10/2002 intitolato "Global Phasing: dalle polveri alle Macromolecole". Responsabile: Prof. C. Giacovazzo.

Incarichi ricoperti:

Coordinatore del BAG di Biologia Strutturale per il sincrotrone ESRF dal titolo "ITABAG: Crystallographic investigations on macromolecules for a structure-based approach to One Health" che consente l'accesso alle linee di fascio per la cristallografia di proteine di 23 gruppi italiani. Incarico svolto a partire da marzo 2025.

Consulente per la selezione di un candidato per l'esecuzione di un progetto R&D sulla Pair Distribution Function, commissionato dalla ditta svizzera Excelsus Structural Solutions. Incarico extraistituzionale n.15342 autorizzato dal CNR e svolto a ottobre 2023.

Referente del CNR per la gestione dei rapporti relativi alle attività previste nell'ambito della Convenzione di tirocinio di formazione ed orientamento tra l'Istituto di Cristallografia del CNR e il Politecnico di Bari. Incarico conferito dal Dott. M. Saviano (prot. CNR-IC n.32 del 13/01/2015) e svolto a partire dal 2015.

Addetto al Personale Disabile nella gestione di una emergenza. Incarico conferito dal Dott. M. Saviano (prot. CNR-IC n.163 del 03/02/2014) e svolto a partire dal 2014.

Responsabile della manutenzione della parte di codice relativo al Molecular Replacement, Patterson-base algorithms e Free-Lunch dei programmi SIR e IL MILIONE. Responsabile del supporto agli utenti per questioni legati ai suddetti algoritmi. Rif.: L'attribuzione della responsabilità è indicata nell'help on-line fornito agli utenti insieme al programma. Incarico svolto a partire dal 1 gennaio 2004.

Responsabile della gestione dei piani di rivelatore a pixels di silicio (Si pixels) durante la presa dati dell'esperimento NA57 del CERN (ruolo di esperto on call). Incarico svolto ad agosto 2001.

Coordinatore del software per la simulazione del comportamento del rivelatore a pixels di silicio (SPD) dell'Inner Tracking System dell'esperimento ALICE. Incarico svolto nel 2001.

Comitati scientifici:

Membro del Consiglio di Istituto dell'Istituto di Cristallografia, a partire da giugno 2019
(<https://www.ic.cnr.it/organizzazione/>).

Membro della giunta dell'Associazione Italiana Luce di Sincrotrone a partire dal 2023. Svolge le funzioni di tesoriere. (<https://www.lucedisincrotrone.it/presidente-e-giunta/>).

Membro del comitato di coordinamento della Sezione Macromolecole Biologiche dell'Associazione Italiana di Cristallografia, dal 2018 al 2023 (<https://cristallografia.org/biological-macromolecules-section-2/>).

Membro del Collegio dei Docenti, in qualità di personale non accademico, dipendente di altri enti, per il corso di Dottorato dell'Università degli Studi di Foggia (XXX ciclo), dal titolo: Innovazione e Management di Alimenti ad Elevata Valenza Salutistica, da ottobre 2014 a ottobre 2017.

Membro del gruppo di lavoro sul "Computational Structural Biology and Bioinformatics" per degli utenti italiani dell'infrastruttura "INSTRUCT - An Integrated Structural Biology Infrastructure for Europe". Il gruppo di lavoro aveva la finalità di Coordinare le attività della comunità italiana attiva nella Biologia Computazionale. Attività svolta da giugno 2009 a giugno 2016.

Membro del gruppo di lavoro incaricato di redigere una roadmap sul Modelling Computazionale per conto del Dipartimento di Progettazione Molecolare del CNR. Il gruppo di lavoro ha contribuito alla elaborazione della Research Agenda del Dipartimento di Progettazione Molecolare, a cura di M.R. Bruni e S. Viticoli, pp.149-159, finito di stampare in giugno 2009. Attività svolta da maggio 2008 a giugno 2009.

Associazioni scientifiche:

Membro della Società Italiana Luce di Sincrotrone (SILS), a partire dal 2022;

Membro dell'Associazione Cristallografica Italiana, a partire dal 2002;

Membro dell'Associazione Italiana di Chimica, nel 2019;

Membro dell'Accademia Pugliese delle Scienze, nel 2018;

Membro dell'European Crystallographic Association, dal 2010 al 2016.

Membro dell'American Crystallographic Association, nel 2013.

Membro del Centro Dipartimentale Magna Grecia del Politecnico di Bari, dal 2013 al 2015.

Membro del Consorzio Interuniversitario di Ricerca in Chimica dei Metalli nei Sistemi Biologici, dal 2012 al 2016.

È stato membro delle seguenti commissioni:

commissione esaminatrice della selezione per titoli e colloquio bando n.IC_014_2024_Ba, Prot. n.217885 del 25/06/2024, per il conferimento di un assegno di ricerca nell'ambito del progetto "MENDELEEV – green revolution by Merging mEtal–orgaNic frameworks with Deep Eutectic soLvEnts for the dEvelopment of

sustainable technologies and artificial nitrogen fixation", da svolgersi presso l'Istituto di Cristallografia. Ha svolto il ruolo di presidente di commissione. Provvedimento di nomina prot. CNR-IC n.245172 del 12/07/2024.

commissione esaminatrice della selezione per titoli e colloquio bando n.245.13 RIC IPSP, per l'assunzione di un ricercatore a tempo determinato, da svolgersi presso l'Istituto per la Protezione Sonstabile delle Piante. Ha svolto il ruolo di componente. Provvedimento di nomina prot. CNR-IC n.198460 del 11/06/2024.

commissione esaminatrice della selezione per titoli e colloquio bando n.IC_018_2024_Ba, Prot. n.250032 del 16/07/2024, per il conferimento di un assegno di ricerca nell'ambito del progetto "INtegrated Theoretical and Experimental Study for the development of new generAtion excitonic SOLar cELls (INTESA-SOLE)", da svolgersi presso l'Istituto di Cristallografia. Ha svolto il ruolo di componente. Provvedimento di nomina prot. CNR-IC n.278465 del 01/08/2024.

commissione esaminatrice della selezione per titoli e colloquio bando n.IC_002_2024_Ba, Prot. n.21506 del 23/01/2024, per il conferimento di un assegno di ricerca nell'ambito del progetto "MENDELEEV – green revolution by Merging mEtal-organic frameworks with Deep Eutectic solvEnts for the dEvelopment of sustainable technologies and artificial nitrogen fixation", da svolgersi presso l'Istituto di Cristallografia. Ha svolto il ruolo di presidente di commissione. Provvedimento di nomina prot. CNR-IC n.59897 del 22/02/2024.

commissione esaminatrice della selezione per titoli e colloquio bando n.400.5 ISPA PNRR, per l'assunzione di un ricercatore a tempo determinato nell'ambito dello Spoke 2 del Progetto PNRR - PE0000003, PE10 Modelli per un'alimentazione sostenibile, "ON Foods" - Research and innovation network on food and nutrition Sustainability, Safety and Security – Working ON Foods", da svolgersi presso l'Istituto di Scienze delle Produzioni Alimentari. Ha svolto il ruolo di componente. Provvedimento di nomina prot. CNR-IC n.268480 del 14/09/2023.

commissione giudicatrice per la gara a procedura aperta sopra soglia comunitaria per l'affidamento della fornitura di un criomicroscopio elettronico a trasmissione ad alta risoluzione nell'ambito del progetto ITACA.SB relativo al Fondo PNRR per la realizzazione di un sistema integrato di infrastrutture di ricerca e innovazione. Ha svolto il ruolo di presidente di commissione. Provvedimento di nomina prot. CNR-IC n.258808 del 05/09/2023.

commissione esaminatrice della selezione per titoli e colloquio bando n.400.004 – Ricercatore- IBIOM-PNRR, per l'assunzione di un ricercatore a tempo determinato nell'ambito del progetto ELIXIRxNextGenerationIT, da svolgersi presso l'Istituto di Biomembrane, Bioenergetica e Biotecnologie Molecolari. Ha svolto il ruolo di componente. Provvedimento di nomina prot. CNR-IBIOM n.67943 del 07/03/2023.

commissione esaminatrice della selezione per titoli e colloquio bando n.IC_001_2020_Ba, Prot. n.155 del 30/01/2020, per il conferimento di un assegno di ricerca nell'ambito del progetto "The inorganic side of lysosome cell biology: the network of metal-protein interactions" (ICHEMFLY)", da svolgersi presso l'Istituto di Cristallografia. Ha svolto il ruolo di presidente di commissione. Provvedimento di nomina prot. CNR-IC n.371 del 25/02/2020.

commissione esaminatrice della selezione per titoli e colloquio bando n.IC_004_2016_Ba, Prot. n.1493 del 15/09/2016, per il conferimento di un assegno di ricerca nell'ambito del progetto "Revolutionising Downstream Processing of Monoclonal Antibodies by Continuous Template-Assisted Membrane Crystallization - AMECRYs", da svolgersi presso l'Istituto di Cristallografia. Ha svolto il ruolo di presidente di commissione. Provvedimento di nomina prot. CNR-IC n.1642 del 6/10/2016.

commissione esaminatrice della selezione per titoli e colloquio per il conferimento di un assegno di ricerca nell'ambito del progetto FIRB-MIUR Codice RBAP114AMK_006 dal titolo "Rete integrata per la Nano Medicina (RINAME)", da svolgersi presso l'Istituto di Cristallografia. Ha svolto il ruolo di presidente di commissione. Provvedimento di nomina prot. CNR-IC n.157 del 9/2/2012.

commissione esaminatrice della selezione per titoli e colloquio per il conferimento di un assegno di ricerca nell'ambito del progetto della Fondazione Cariplo n.2011-0289 dal titolo "Metal-Organic-based Nanoparticle Arrays with Large Induced Shape Anisotropy (MONA LISA)", da svolgersi presso il Dipartimento di

Scienza e Alta Tecnologia dell'Università degli Studi dell'Insubria, sede di Como. Ha svolto il ruolo di membro supplente. Provvedimento di nomina prot. CNR-IC n.1024 del 25/6/2012.

commissione esaminatrice per il conferimento di un assegno di ricerca nell'ambito del progetto della Fondazione Cariplo n.2009-2446 dal titolo "Nanocristalli di interesse tecnologico e biomedicale: aspetti strutturali e funzionali", da svolgersi presso il Dipartimento di Scienza e Alta Tecnologia dell'Università degli Studi dell'Insubria, sede di Como. Ha svolto il ruolo di membro supplente. Provvedimento di nomina prot. CNR-IC n.661 del 28/4/2010.

commissione giudicatrice per la valutazione delle offerte pervenute nell'ambito di una gara per l'acquisizione in economia di materiale hardware presso l'Istituto di Cristallografia. Provvedimento di nomina prot. CNR-IC n.781 del 21/10/2008.

commissione esaminatrice per il conferimento dell'assegno di ricerca n.126.268/AR/02, dal titolo "Soluzione del problema della fase per macromolecole proteiche in cristallografia", da svolgersi presso l'Istituto di Cristallografia. Provvedimento di nomina prot. CNR-IC n.40 del 16/11/2004.

Titoli:

E' titolare del seguente brevetto:

Titolo: Processo per la Produzione di Nanocristalli di Calcoalogenuri Metallici

Numero domanda 102022000001577

Data Deposito: 31/01/2022

Data Pubblicazione: 31/07/2023

Titolari e quote: Consiglio Nazionale delle Ricerche (55%); Università del Salento (22%); Istituto Italiano di Tecnologia (13 %); Università Cattolica del Sacro Cuore (10 %)

Livello TRL: 3/4

Rif. Brevetto CNR n. 10861

Co-inventori: Carlo Giansante, Danila Quarta, Stefano Toso, Roberto Giannuzzi, Rocco Caliandro, Anna Moliterni, Cinzia Giannini, Liberato Manna, Giuseppe Gigli.

Estensione US n. US 2025/0178919 A1

Data Pubblicazione: 5/6/2025

Premi:

Certificato di apprezzamento dall'International Centre for Diffraction Data. Il riconoscimento è stato assegnato per aver contribuito a depositare nel database PDF-4+ 2023 un nuovo profilo di diffrazione nel corso del 2022.

Procedura selettiva per la riduzione dei tempi di permanenza nella fascia stipendiale per i ricercatori del CNR (bando n. 364.174 – determinazione costo e assegnazione anticipazioni di fascia del 19 marzo 2019);

Premio 2005 destinato a ricercatori e tecnologi del CNR, attribuito per aver raggiunto nell'anno 2005 risultati di eccellenza e innovazione di particolare importanza strategica. Il premio è stato attribuito dal Presidente del CNR, Prof. Luciano Maiani, con decreto prot. n.68163 del 01/10/2009.

Premio per il miglior poster presentato alla Conferenza di Dipartimento, organizzata dal Dipartimento Scienze Chimiche e Tecnologie dei Materiali del CNR e svoltasi a Bressanone dal 28 al 30 Ottobre 2019, per la sessione "Materiali Avanzati". (<https://www.dsctm.cnr.it/it/conferenza-di-dipartimento-2019.html>). Il poster si intitolava "Structural characterization of halide perovskites by X-ray measurements and advanced analysis".

Certificato di apprezzamento (Certificate of Appreciation) da ACS Publications a Febbraio 2013. Il riconoscimento è stato assegnato per il successo ottenuto dal libro Powder Diffraction Theory and Practice, edited by R.E. Dinnebier and S.J.L. Billinge, RSC Publishing (2008), a cui ho contribuito col capitolo Crystal Structure Determination p. 227-261, e per l'attività di referaggio svolta per giornali editi da ACS Publications.

Premio per il miglior poster presentato al "Meeting 2011 dell'Associazione Svizzera di Cristallografia (SGK), tenutosi a Berna (16 settembre 2012). Il poster si intitolava "Modulated excitation spectroscopy adapted to Crystallography". Il premio è consistito in 250 franchi svizzeri.

Lettera di ringraziamento del Presidente del CNR Dr. Fabio Pistella, che esprime al Dott. Caliandro il ringraziamento del CNR e del suo Presidente per aver contribuito col suo impegno a conseguire quei successi sul piano della ricerca scientifica e dello sviluppo tecnologico che sostanziano la missione del CNR.

Abilitazione Scientifica Nazionale

Abilitazione scientifica nazionale alle funzioni di professore universitario di II fascia del settore concorsuale 03/A2 – modelli e metodologie per le scienze chimiche, conseguita l'1-02-2023 a seguito del Bando 2021 (DD n. 553/2021).

Abilitazione scientifica nazionale alle funzioni di professore universitario di II fascia del settore concorsuale 02/D1 – Fisica Applicata, Didattica e Storia della Fisica, conseguita l'11-11-2020 a seguito del Bando 2018 (DD n. 2175/2018).

Abilitazione scientifica nazionale alle funzioni di professore universitario di II fascia del settore concorsuale 05/E2 – Biologia Molecolare, conseguita il 16-02-2014 a seguito del Bando 2012 (DD n. 222/2012).

Attività di valutazione:

Valutazione di progetti di ricerca internazionali:

"Early spore detection module as a tool to rationalize the use of phytosanitary products in vineyards", presentato alla Agence Nationale de la Recherche (ANR). Incarico extraistituzionale n.21269 autorizzato dal CNR e svolto a luglio 2025.

"Structural immunology of NK cell recognition: from tumor evasion to its eradication", presentato alla Czech Science Foundation (GAČR). Incarico extraistituzionale n.17501 autorizzato dal CNR e svolto a giugno 2024.

"Molecular mechanism of regulation of cyclin-dependent kinase 16 (CDK 16) activity", presentato alla Czech Science Foundation (GAČR). Incarico extraistituzionale n.14372 autorizzato dal CNR e svolto a luglio 2023.

"Shaping the tumor physical microenvironment by lithography techniques (STORM)", presentato alla Università di Modena e Reggio Emilia. Incarico extraistituzionale n.14288 autorizzato dal CNR e svolto a giugno 2023.

"The role of calcium and 14-3-3 protein in the regulation of the human ubiquitin ligase Nedd4-2", presentato alla Czech Science Foundation (GAČR). Incarico extraistituzionale n.11709 autorizzato dal CNR e svolto a luglio 2022.

"Pushing the limits of complexity in solving crystal structures using a combination of XRPD and ssNMR", presentato alla Czech Science Foundation (GAČR). Incarico extraistituzionale n.11616 autorizzato dal CNR e svolto a luglio 2022.

"Development of method for polymorph control in case of unselective formation of polymorphs using crystallization additives" e "Carrier-supported antioxidants - a novel concept for enhanced activity" per conto del Latvian Council of Science (LCS). Ho inoltre svolto il ruolo di rapporteur per i due progetti e partecipato ai lavori del panel di Chimica, che ho svolto la valutazione finale di 26 progetti. Incarico extraistituzionale n.9742 autorizzato dal CNR svolto a novembre 2021.

"Development of method for polymorph control in case of concomitant polymorphs using crystallization additives" per conto della Central Finance Contracting Agency (CFCA) della Lettonia. Incarico extraistituzionale n.6245 autorizzato dal CNR svolto a ottobre 2020.

"Protein and peptide nanocrystal growth and delivery for crystallography at continuous and femtosecond X-ray sources", presentato alla Czech Science Foundation (GAČR). Incarico extraistituzionale n.5630 autorizzato dal CNR svolto a luglio 2020.

"The fascinating physical chemistry of DNA studied by advanced computations", presentato alla Czech Science Foundation (GAČR). Incarico extraistituzionale n.5520 autorizzato dal CNR svolto a luglio 2020.

"Amyloid fibrils unravelled by neutron scattering & molecular dynamics simulations", presentato per il bando "Beyond Borders" dell'Università di Roma Tor Vergata. Incarico extraistituzionale n.3326 autorizzato dal CNR svolto ad agosto 2019.

"Nanocrystallography of molecular crystals", presentato alla Czech Science Foundation (GAČR). Incarico extraistituzionale n.3266 autorizzato dal CNR svolto ad agosto 2019.

"Dynamic behaviour of nanoalloys during CO₂ activation: modulation excitation spectroscopy", presentato alla Research Foundation - Flanders (FWO). Incarico extraistituzionale n.3091 autorizzato dal CNR svolto a luglio 2019.

"Molecular modeling of RNA molecules and their complexes: the role of structural dynamics", presentato alla Czech Science Foundation (GAČR). Incarico extraistituzionale n.3069 autorizzato dal CNR svolto a luglio 2019.

"Molecular basis of the 14-3-3 protein-dependent regulation of protein kinase activity" presentato alla Czech Science Foundation (GAČR). Incarico extraistituzionale n.898 autorizzato dal CNR svolto a ottobre 2018.

"Optimization of GEMMA methodology by design of experiment for detection of nanoparticles occurred during enzymatic reactions" presentato per il bando JESH dell'Accademia austriaca delle scienze (ÖAW). Rif. E-mail di invito a revisionare il progetto, inviata dal Presidente dell'Austrian Academy of Sciences, Prof. Joanna Kölbl, ricevuta il 19/02/2016

"New methods to solve macromolecular structures from limited data" presentato per il bando HTSM2017 dell'Organizzazione olandese per la ricerca scientifica (NWO).

Structural studies on proteins from *Helicobacter pylori* relevant for Bacterial host colonization and survival" presentato per il programma PISCOPIA dell'Università di Padova, cofinanziato dal programma Marie Curie COFUND. Rif. e-mail del 6/6/2014 da parte del Servizio Consulenza Pagamenti del CINECA, che specifica i dettagli dell'ordine bancario per il pagamento per le prestazioni di valutatore dei Progetti PISCOPIA Fellowship Programme.

Valutazione di progetti di ricerca industriale:

Esperto tecnico-scientifico nominato dal CNR per la valutazione dei seguenti progetti di ricerca industriale e sviluppo sperimentale presentati nell'ambito dei bandi MiSE - Fondo per la Crescita Sostenibile:

- i. Progetto pos. N.142 dal titolo: "Innovazione e sicurezza nei cantieri: totem intelligenti e prevenzione dei rischi" presentato da L.P. Edilizia 2019 S.r.l e Osmosi S.p.A. per il bando STEP Azione 1.6.1. Attività svolta a partire dal 23-09-2025.
- ii. Progetto pos. N.315 dal titolo: "Green Building Safety" presentato da EKORU S.r.l. per il bando Accordo Innovazione DM 31/12/2021 (Primo Bando). Attività svolta a partire dal 28-09-2022.
- iii. Progetto pos. N.347 dal titolo: "Micro/nanoformulati innovativi per la valorizzazione delle molecole bioattive, utili per il salute e il benessere della popolazione, ottenuti da prodotti di scarto della filiera ittica" presentato da Avantech Group S.r.l. per il bando Horizon 2020– PON 2014/2020. Attività svolta a partire dal 01-03-2019.
- iv. Progetto pos. N.30 dal titolo: "Nuova generazione di prodotti alimentari salutistica base carne: senza antibiotici - senza allergeni" presentato da Martini S.p.A. per il bando Horizon 2020– PON 2014/2020. Attività svolta a partire dal 01-08-2018.
- v. Progetto pos. N.174 dal titolo: "Sviluppo di una nuova piattaforma polimerica basata su idrogeli superassorbenti per il controllo glicemico" presentato da Gelesis S.r.l. per il bando Horizon 2020– PON 2014/2020. Attività svolta a partire dal 01-12-2016.

Valutatore di articoli per conto dell'ANVUR

Componente del GEV 5 – Scienze Biologiche per la Valutazione della Qualità della Ricerca 2015-2019. Incarico extraistituzionale n.6292 autorizzato dal CNR, svolto da Novembre 2020 a Maggio 2021.

Valutazione dei seguenti articoli per conto dell'Agenzia Nazionale di Valutazione del Sistema Universitario e della Ricerca (ANVUR), nell'ambito della VQR 2011-2014:

- i. Prodotto n. 142636, pubblicato in Physical Review E - Statistical, Nonlinear and Soft Matter Physics, GEV 2 – Scienze Fisiche, valutazione sottomessa il 31/12/2016;
- ii. Prodotto n. 185415, pubblicato in Nucleic Acids Research, GEV 3 - Scienze Chimiche, valutazione sottomessa il 28/12/2016;
- iii. Prodotto n. 273621, pubblicato in La Rivista del Nuovo Cimento della Società Italiana di Fisica, GEV 6 – Scienze Mediche, valutazione sottomessa il 07/07/2016;
- iv. Prodotto n. 446828, pubblicato in CELL, GEV 5 – Scienze Biologiche, valutazione sottomessa il 27/12/2016;

Attività editoriale:

Membro di comitati editoriali

membro del comitato editoriale (associate editor) della sezione Structural Biology della rivista Frontiers in Molecular Biosciences (<https://www.frontiersin.org/journals/molecular-biosciences/editors>). La rivista ha ISSN 2296-889X e impact factor 6.1. Attività svolta dal 2022 al 2025.

membro del comitato editoriale della rivista Crystals (<https://www.mdpi.com/journal/crystals/editors>). Casa editrice: MDPI. Editore della sessione Biomolecular Crystals (Section Board Member) (https://www.mdpi.com/journal/crystals/sectioneditors/Biomolecular_Crystals). La rivista ha ISSN 2073-4352 e impact factor 2.7. Attività svolta dal 2016.

membro del comitato editoriale della rivista PhysChem (<https://www.mdpi.com/journal/physchem/editors>). Casa editrice: MDPI. La rivista ha ISSN: 2673-7167. Attività svolta dal 2021.

membro del comitato editoriale della rivista Solids (<https://www.mdpi.com/journal/solids/editors>). Casa editrice: MDPI. La rivista ha ISSN: 2673-6497. Attività svolta dal 2020.

membro dell'Advisory Board della rivista Sci (<https://www.mdpi.com/journal/sci/editors>). Casa editrice: MDPI. La rivista ha ISSN 2413-4155. Attività svolta dal 2029,

caporedattore della rivista Applied Physics Research (<http://www.ccsenet.org/journal/index.php/apr/editor>). Casa editrice: Canadian Center of Science and Education. La rivista ha ISSN 1916-9639 (Print) e ISSN 1916-9647 (Online). Attività svolta dal 2028.

Curatore di volumi tematici:

special issue intitolato "Opportunities and Challenges in Protein Crystallography" per le riviste Molecules e Solids, edite da MDPI (https://www.mdpi.com/journal/crystals/special_issues/27R5Z29A7R). Attività svolta nel 2025.

special issue intitolato "Research on Crystallization of Biomacromolecules" per la rivista Crystals, edita da MDPI (https://www.mdpi.com/journal/crystals/special_issues/D3FTBVYF63). Attività svolta nel 2025.

special issue intitolato "New Advances in Protein Crystallography" per la rivista Crystals, edita da MDPI (https://www.mdpi.com/journal/crystals/special_issues/27R5Z29A7R). Attività in corso di svolgimento. Attività svolta nel 2024.

special issue intitolato "Selected Papers from the 2nd International Online Conference on Crystals" per la rivista Crystals, edita da MDPI

(https://www.mdpi.com/journal/crystals/special_issues/Crystals_Conference). Attività svolta Dal 01-10-2020 al 30-09-2021.

special issue intitolato "Multivariate Analysis Applications to Crystallography" per la rivista Crystals, edita da MDPI (https://www.mdpi.com/journal/crystals/special_issues/multivariate_analysis). Attività svolta dal 01-06-2019 al 01-06-2020.

special issue intitolato "Development of Computational Methods for Structure Determination of Biological Macromolecules" per la rivista Crystals, edita da MDPI (https://www.mdpi.com/journal/crystals/special_issues/computational_method_macromolecules). Attività svolta dal 01-06-2016 al 31-05-2017.

tre capitoli della Encyclopedia of Membranes, edito da SpringerLink (<https://link.springer.com/referencework/10.1007/978-3-662-44324-8>). I capitoli si intitolano "Chemometrics", "Phasing Methods in Crystal Structure Determination" e "Multivariate Analyses" (<https://link.springer.com/search?query=caliandro&facet-eisbn=978-3-662-44324-8&facet-content-type=ReferenceWorkEntry>). Attività svolta nel 2016.

Editore di 41 pubblicazioni per le riviste Crystals (32), Molecules (2), Solids (4) e PhysChem (3). In queste pubblicazioni appare come Academic Editor nell'articolo open access finale.

Revisione di manoscritti per le seguenti riviste scientifiche: Acta Crystallographica A (2), Acta Crystallographica D (4), ACS Catalysis (1), Advanced Science (1), Applied Physics Research (14), Bioinorganic Chemistry and Applications (1), Cellular and Molecular Life Sciences (1), ChemComm (1), Chemical Engineering Research and Design (3), Communications Biology (1), Current Medicinal Chemistry (1), CrystEngComm (1), Crystals (8), Drug Designing (2), Food Chemistry (3), Foods (1), Frontiers in Chemical Biology (2), Frontiers Immunology (1), Future Medicinal Chemistry (1), Inorganic Chemistry (1), International Journal of Drug Development and Research (1), International Journal of Biological Macromolecules (2), Journal of Biomolecular Structure & Dynamics (1), International Journal of Molecular Biology and Medicine (1), International Journal of Molecular Sciences (2), International Journal of Pharmaceutics (1), Journal of American Chemical Society (4), Journal of Applied Crystallography (2), Journal of Genetics Syndromes & Gene Therapy (1), Journal of Materials Science Research (1), Journal of Molecular Structure (1), Journal of Medical Virology (1), Journal of Molecular Liquids (1), Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis (2), Materials Letters (1), Materials Chemistry and Physics (1), Materials Today (1), Medicinal Chemistry (1), Microgravity (1), Molecules (2), Minerals (1), Nature (1), Npj computational materials (1), Nano Letters (1), Nanoscale (1), Physical Chemistry Chemical Physics (1), Pharmacology Research & Perspectives (1), Phytomedicine (1), PlosOne (3), RCS Advances (1), RCS Separation and Purification Technology (1), RCS Sustainability (1), Redox Biology (1), Sci (1), Scientific Reports (3), The Journal of Chemical Physics (1), The Journal of Physical Chemistry (1).

Attività didattica:

Corsi di alta formazione

Denominazione struttura: Istituto di Cristallografia

Sede: Bari

Attività svolta: Lezioni dal titolo "When molecular dynamics meets experimental data: a win-win approach", "Fitting SAXS, cryo-EM and crystallographic maps by MD" e "MDFP" per la "In-silico Structural Biology School" organizzata dall'Associazione Italiana di Cristallografia, tenutasi a Bari.

Materia di insegnamento: Modellistica computazionale

Periodo di attività: 28-31 ottobre 2024 (4 ore).

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari

Sede: Bari

Attività svolta: Lezione sulle moderne tecniche cristallografiche e di modeling per omologia, nell'ambito del corso di Competenze Trasversali 'Metodi intelligenti nella scoperta di nuovi farmaci e nella diagnostica medica'.

Materia di insegnamento: Cristallografia di proteine

Periodi di attività: 31 marzo 2023 (1.5 ore); 11 aprile 2024 (1 ora).

Denominazione struttura: Dipartimento di Farmacia – Scienze del Farmaco dell'Università degli Studi di Bari
Sede: Bari

Attività svolta: Lezioni sulle moderne tecniche cristallografiche applicate allo structure-based drug design

Tipologia di corso: Le lezioni sono state tenute nell'ambito dell'insegnamento di "Strategie di design e sintesi dei farmaci" per i corsi di Laurea magistrale a ciclo unico in Farmacia e in Chimica e Tecnologia Farmaceutica e per i dottorandi in Scienze Biomolecolari Farmaceutiche e Mediche.

Materia di insegnamento: Cristallografia di proteine

Periodi di attività: il 02/05/2017 (2 ore), dal 16 al 20 novembre 2018 (4 ore), dal 15 al 20 novembre 2019 (5 ore), dal 1 al 3 Dicembre 2020 (5 ore), dal 15 al 16 Dicembre 2021 (5 ore), dal 17 al 18 Novembre 2022 (5 ore), dal 16 al 17 Novembre 2023 (5 ore).

Denominazione struttura: Dipartimento di Bioscienze, Biotecnologie e Biofarmaceutica dell'Università degli Studi di Bari

Sede: Bari

Attività svolta: Lezioni sulle moderne tecniche cristallografiche applicate allo studio delle proteine

Tipologia di corso: Le lezioni sono state tenute nell'ambito dell'insegnamento di "Analisi funzionale del proteoma e proteomica applicata" per il corso di Laurea in Biotecnologie Mediche e Medicina Molecolare

Materia di insegnamento: Cristallografia di proteine

Atto di conferimento: 3 lettere di ringraziamento, firmate dal Direttore del Dipartimento di Bioscienze, Biotecnologie e Biofarmaceutica dell'Università degli Studi di Bari, Prof. Maria Svelto il 29/01/2014, il 23/01/2015 e il 10/02/2016

Periodi di attività: Dal: 17/12/2013 Al: 19/12/2013 (5 ore), Dal: 7/1/2015 al: 8/1/2015 (4 ore), Dal: 14/1/2016 al: 15/1/2016 (4 ore).

Denominazione struttura: "From Gene to Protein Crystal Structure School"

Sede: Trieste

Attività svolta: Lezione dal titolo "Phasing methods" (<http://www.gecryschool-edition-1.it/>).

Periodo di attività: Dal: 22/09/2020 al 25/09/2020 (2 ore)

Denominazione struttura: 4th European Crystallographic School (ECS4)

Sede: Varsavia

Attività svolta: Lezioni dal titolo "Crystal structure solution – from small molecules to large biological assemblies" e "Structure solution and refinement". E' stato membro della commissione per la selezione del miglior poster presentato dagli alunni.

Periodo di attività: Dal: 2/07/2017 al 7/07/2017 (4 ore)

Denominazione struttura: International School "Crystallography Beyond Diffraction", 2nd Edition

Sede: Camerino

Attività svolta: Lezione dal titolo "Multivariate Analysis Methods for X-ray and Spectroscopic Data"

Materia di insegnamento: Metodi Cristallografici

Periodo di attività: Dal: 4/09/2013 Al: 8/09/2013 (4 ore)

Denominazione struttura: European School of Medicinal Chemistry (ESMEC)

Sede: Urbino

Attività svolta: Lezione dal titolo "Protein Crystallography and Fragment-based Drug Design"

Materia di insegnamento: Cristallografia di proteine

Periodo di attività: Dal: 4/07/2011 (4 ore)

Denominazione struttura: Dipartimento Interateneo di Fisica dell'Università degli Studi di Bari

Sede: Bari

Attività svolta: Lezione dal titolo "Metodi computazionali per la determinazione della struttura cristallina di proteine"

Tipologia di corso: Corso per dottorandi della Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica

Materia di insegnamento: Biologia Strutturale Computazionale

Periodo di attività: Dal: 29/10/2009 Al: 29/10/2009 (2 ore)

Denominazione struttura: Scuola Nazionale di Diffrazione da Materiali Policristallini Sede: Martina Franca (TA)

Attività svolta: Lezione dal titolo Analisi Strutturale I: Metodi Diretti e Patterson. Gli atti della scuola sono stati pubblicati nel volume "Analisi di Materiali Policristallini mediante Tecniche di Diffrazione, edito da N. Masciocchi e A. Guagliardi, ISBN 88-901915-8-9.

Materia di insegnamento: Metodi Cristallografici

Periodo di attività: Dal: 26/06/2006 Al: 30/06/2006 (4 ore)

Denominazione struttura: International school-workshop for young physicists Relativistic Heavy-Ion Physics Sede: Praga, Repubblica Ceca

Attività svolta: Lezione dal titolo: "Hyperon production in proton-lead and lead-lead collisions at 158 GeV/c per nucleon" Tipologia di corso: International School-Workshop.

Materia di insegnamento: Physics of ultra-relativistic heavy ion collisions

Periodo di attività: Dal: 01/09/1997 Al: 05/09/1997 (2 ore)

Corsi universitari tenuti in qualità di docente titolare del corso

Denominazione struttura: Dipartimento di Biologia dell'Università degli Studi di Bari

Sede: Bari

Attività svolta: Insegnamento in qualità di titolare del corso

Tipologia di corso: Corso di Fisica S.S.D FIS/07 da 6 CFU per il corso di Laurea in Scienze della Natura

Materia di insegnamento: Fisica

Periodo di attività: Dal: 1/03/2016 Al: 1/03/2017 (55 ore)

Denominazione struttura: Politecnico di Bari

Sede: Taranto

Attività svolta: Insegnamento in qualità di titolare del corso

Tipologia di corso: Corso di Fisica II – I modulo da 6 CFU per il corso di Laurea in Ingegneria Civile e Ambientale del Dipartimento di Ingegneria Civile, Ambientale, del Territorio, Edile e di Chimica

Materia di insegnamento: Fisica

Periodo di attività: Dal: 1/03/2015 Al: 30/04/2016 (55 ore)

Denominazione struttura: Politecnico di Bari

Sede: Taranto

Attività svolta: Insegnamento in qualità di titolare del corso

Tipologia di corso: Corso di Fisica Generale – II modulo da 6 CFU per il corso di Laurea in Ingegneria Meccanica del Dipartimento di Meccanica, Matematica e Management

Materia di insegnamento: Fisica

Periodo di attività: Dal: 1/03/2015 Al: 30/04/2016 (55 ore)

Denominazione struttura: Politecnico di Bari

Sede: Taranto

Attività svolta: Insegnamento in qualità di titolare del corso

Tipologia di corso: Corso di Fisica II – Moduli I e II, per complessivi 12 CFU per il corso di Laurea in Ingegneria Civile e Ambientale del Dipartimento di Ingegneria Civile, Ambientale, del Territorio e di Chimica

Materia di insegnamento: Fisica

Periodo di attività: Dal: 4/3/2014 Al: 31/05/2015 (110 ore)

Denominazione struttura: Politecnico di Bari

Sede: Taranto

Attività svolta: Insegnamento in qualità di titolare del corso

Tipologia di corso: Corso di Fisica Generale – II modulo da 6 CFU e Fisica Generale – II modulo da 6 CFU per il corso di Laurea in Ingegneria Meccanica del Dipartimento di Meccanica, Matematica e Management

Materia di insegnamento: Fisica

Periodo di attività: Dal: 1/3/2014 Al: 30/04/2015 (55 ore)

Denominazione struttura: Politecnico di Bari

Sede: Taranto

Attività svolta: Insegnamento in qualità di titolare del corso

Tipologia di corso: Corso di Fisica Generale II – Modulo I da 6 CFU per il corso di Laurea in Ingegneria Civile e per l'Ambiente e il Territorio del Dipartimento di Ingegneria Civile, Ambientale, del Territorio e di Chimica

Materia di insegnamento: Fisica

Periodo di attività: Dal: 4/3/2013 Al: 30/04/2014 (55 ore)

Denominazione struttura: Politecnico di Bari

Sede: Taranto

Attività svolta: Insegnamento in qualità di titolare del corso

Tipologia di corso: Corso di Fisica Generale – I modulo da 6 CFU e Fisica Generale – II modulo da 6 CFU per il corso di Laurea in Ingegneria Meccanica del Dipartimento di Meccanica, Matematica e Management

Materia di insegnamento: Fisica

Periodo di attività: Dal: 1/10/2012 Al: 30/04/2014 (110 ore)

Denominazione struttura: Politecnico di Bari

Sede: Taranto

Attività svolta: Insegnamento in qualità di titolare del corso

Tipologia di corso: Corso di Fisica Generale A da 12 CFU per il corso di Laurea in Ingegneria Elettrica e delle Telecomunicazioni del Dipartimento di Ingegneria Elettronica e dell'Informazione

Materia di insegnamento: Fisica

Periodo di attività: Dal: 1/10/2012 Al: 30/04/2014 (110 ore)

Denominazione struttura: Politecnico di Bari

Sede: Taranto

Attività svolta: Insegnamento in qualità di titolare del corso

Tipologia di corso: Corso di Fisica Generale II – Modulo I da 6 CFU per il corso di Laurea in Ingegneria Civile e per l'Ambiente e il Territorio

Materia di insegnamento: Fisica

Periodo di attività: Dal: 5/3/2012 Al: 30/04/2013 (55 ore)

Corsi tenuti in qualità di esercitatore

Denominazione struttura: Politecnico di Bari

Sede: Bari

Attività svolta: Insegnamento frontale.

Tipologia di corso: Corso di preparazione e approfondimento per lo studio delle materie di base

Materia di insegnamento: Fisica

Periodo di attività: Dal: 12/09/2016 Al: 24/09/2016 (20 ore)

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari "Aldo Moro"

Sede: Bari

Attività svolta: Partecipazione, in qualità di docente, alle esercitazioni condotte su strumentazioni dell'Istituto di Cristallografia

Tipologia di corso: Corso di Cristallografia con laboratorio (Laurea in Scienze dei Materiali)

Materia di insegnamento: Cristallografia

Periodo di attività: Dal: 01/01/2006 Al: 01/01/2007 (19 ore)

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari "Aldo Moro"

Sede: Bari

Attività svolta: Partecipazione, in qualità di docente, alle esercitazioni condotte su strumentazioni dell'Istituto di Cristallografia Tipologia di corso: Corso di Cristallografia (Laurea in Chimica, nuovo ordinamento)

Materia di insegnamento: Cristallografia

Periodo di attività: Dal: 01/01/2005 Al: 01/01/2006 (18 ore)

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari "Aldo Moro"

Sede: Bari

Attività svolta: Partecipazione, in qualità di docente, alle esercitazioni condotte su strumentazioni dell'Istituto di Cristallografia Tipologia di corso: Corso di Mineralogia con esercitazioni (Laurea in Chimica, vecchio ordinamento)

Materia di insegnamento: Cristallografia

Periodo di attività: Dal: 01/01/2002 Al: 01/01/2004 (18 ore)

Denominazione struttura: Facoltà di Ingegneria del Politecnico di Bari

Sede: Bari

Attività svolta: Ciclo di sostegno alla didattica

Tipologia di corso: Corso di Laurea in Ingegneria Informatica

Materia di insegnamento: Fisica Generale I

Periodo di attività: Dal: 01/09/2001 Al: 01/08/2002 (10 ore)

Denominazione struttura: CNR - Istituto di Ricerca per lo Sviluppo di Metodologie Cristallografiche (IRMEC)

Sede: Bari

Attività svolta: Partecipazione alle esercitazioni pratiche, in qualità di tutor, per la dimostrazione dei programmi SIR97, EXTRA, SIRPOW.97 ed EXPO durante il V SIR Workshop: SIRWARE96: single crystal and powder data X-rays, neutrons and electrons, svoltosi a Bari dal 17 al 21 dicembre 1996.

Tipologia di corso: Workshop internazionale

Materia di insegnamento: Uso di programmi di calcolo cristallografico

Periodo di attività: Dal: 17/12/1996 Al: 21/12/1996 (6 ore)

Denominazione struttura: Facoltà di Ingegneria del Politecnico di Bari

Sede: Bari

Attività svolta: Ciclo di sostegno alla didattica

Tipologia di corso: Corso di Laurea in Ingegneria Elettronica

Materia di insegnamento: Fisica I

Periodo di attività: Dal: 01/10/1996 Al: 01/08/1997 (10 ore)

Denominazione struttura: Facoltà di Ingegneria del Politecnico di Bari

Sede: Bari

Attività svolta: Ciclo di sostegno alla didattica

Tipologia di corso: Corso di Laurea in Ingegneria Elettronica

Materia di insegnamento: Fisica Generale I

Periodo di attività: Dal: 01/10/1995 Al: 01/08/1996 (10 ore)

Tesi di Dottorato:

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari

Attività svolta: Attività di co-tutela per tesi di dottorato, relativa al dottorato di ricerca in tecnologie sostenibili per lo sviluppo industriale di medicinali e diagnostici del Dipartimento di Farmacia – Scienze del Farmaco dell'Università degli Studi di Bari, cofinanziato dalla ditta EXCELSUS STRUCTURAL SOLUTIONS..

Tipologia di tesi: Tesi sperimentale per il XLI ciclo di Dottorato

Titolo tesi: Caraterizzazione strutturale di composti di interesse farmaceutico tramite pair distribution function

Nominativo studente: Mauro De Feudis

Periodo di attività: Dal: 01/10/2025

Denominazione struttura: Università degli Studi di Foggia

Attività svolta: Tutor per tesi di dottorato, relativa al per il corso di Dottorato dell'Università degli Studi di Foggia (XXX ciclo), dal titolo: Innovazione e Management di Alimenti ad Elevata Valenza Salutistica

Tipologia di tesi: Tesi sperimentale, redatta in lingua inglese, per il XXX ciclo di Dottorato

Titolo tesi: Characterization Of Enzymes For The Food Industry And Active Packaging

Nominativo studente: Valentina Mirabelli

Periodo di attività: Dal: 01/10/2014 Al 30/09/2017

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari

Attività svolta: Attività di co-tutela per tesi di dottorato, relativa al dottorato di ricerca in Sintesi Chimica ed Enzimatica Applicata della Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Bari, ed in particolare alla attività di ricerca presso l'Istituto di Cristallografia di Bari

Tipologia di tesi: Tesi sperimentale, redatta in lingua inglese, per il XXIV ciclo di Dottorato

Titolo tesi: X-ray studies of metal ion interaction with proteins involved in proteolytic pathways

Nominativo studente: Benny Danilo Belviso

Periodo di attività: Dal: 01/10/2009 Al: 31/12/2011

Corsi per le scuole:

Denominazione struttura: Liceo Scientifico IISS Marconi-Hack

Sede: Bari

Attività svolta: Percorso per le competenze trasversali e per l'orientamento (PCTO) dal titolo "La Cristallografia: i segreti del microscopio più potente" organizzato e svolto per una classe terza (23 partecipanti) e una classe 4 (25 partecipanti).

Periodo di attività: marzo-giugno 2022 (20 ore); febbraio-maggio 2023 (20 ore)

Tirocini post lauream:

Denominazione struttura: CNR – Istituto di Cristallografia

Attività svolta: Tutor aziendale per tirocinio post-lauream, finanziato da Italia Lavoro S.p.A

Nominativo studente: Valentina Mirabelli

Periodo di attività: Dal: 08/01/2014 Al: 01/07/2014

Tesi di Laurea:

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari

Attività svolta: correlatore per tesi di laurea triennale

Corso di laurea: Chimica e Tecnologia Farmaceutiche

Nominativo studente: Angela Natale

Titolo della tesi: caratterizzazione strutturale di composti di interesse farmaceutico in interazione con materiali porosi o proteine tramite diffrazione di raggi X

Periodo di attività: Dal: 15/9/2025

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari

Attività svolta: correlatore per tesi di laurea triennale

Corso di laurea: Scienze Biosanitarie

Nominativo studente: Valeria De Michele

Titolo della tesi: Caratterizzazione strutturale di trasportatori mitocondriali in patologie rare e tumorali

Periodo di attività: Dal: 1/4/2024 al: 28/2/2025

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari

Attività svolta: correlatore per tesi di laurea triennale
Corso di laurea: Chimica e Tecnologia Farmaceutiche
Nominativo studente: Claudia Favia
Titolo della tesi: Il ruolo chiave delle miscele eutetiche profonde nella sintesi di ammidi, sofonammidi e ammine secondarie, e nei processi di cristallizzazione del lisozima
Periodo di attività: Dal: 1/3/2023 al: 30/11/2023

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari
Attività svolta: correlatore per tesi di laurea triennale
Corso di laurea: Biologia Cellulare e Molecolare
Nominativo studente: Daniele Corsini
Titolo della tesi: Caratterizzazione strutturale di trasportatori mitocondriali in patologie rare e tumorali
Periodo di attività: Dal: 1/12/2022 al: 30/11/2023

Denominazione struttura: Dipartimento di Scienze e Innovazione Tecnologia dell'Università del Piemonte Orientale "Amedeo Avogadro"
Attività svolta: Correlatore per tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche
Nominativo studente: Mattia Lopresti
Periodo di attività: Dal: 10/2016 Al: 10/2017

Denominazione struttura: Dipartimento di Meccanica, Matematica e Management del Politecnico di Bari
Attività svolta: Tutor aziendale per tesi di laurea triennale, aa 2016/17
Nominativo studente: Maurizio Colizzi
Periodo di attività: Dal: 11/2015 Al: 06/2016

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari
Attività svolta: Tutor aziendale per tesi di laurea triennale
Nominativo studente: Paolo Pastorelli
Titolo di tesi: Calmodulin crystal production to investigate the binding modes of lubeluzole and analogues
Periodo di attività: Dal: 04/2014 Al: 11/2014

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari
Attività svolta: Tutor aziendale per tesi di laurea triennale
Nominativo studente: Isabella Ventura
Titolo tesi: Inibitori isonipecotammidici della trombina a potenziale attività anticoagulante in vivo: studi di decostruzione frammentale e cristallografia a raggi X.
Periodo di attività: Dal: 10/2011 Al: 3/2012

Denominazione struttura: Dipartimento di Ingegneria Civile, Ambientale, del Territorio, Edile e di Chimica del Politecnico di Bari
Attività svolta: Tutor per tesi di laurea triennale
Tipologia di tesi: Laurea in Fisica
Titolo tesi: Processo di pirolisi di biomasse vegetali: caratterizzazione cristallografica dei residui
Nominativo studente: Loris Vagali
Periodo di attività: Dal: 02/2015 Al: 04/2016

Denominazione struttura: Dipartimento di Ingegneria Civile, Ambientale, del Territorio, Edile e di Chimica del Politecnico di Bari
Attività svolta: Tutor per tesi di laurea triennale, aa 2014/15
Tipologia di tesi: Laurea in Fisica
Titolo tesi: Determinazione dell'impronta digitale di prodotti agroalimentari tramite cristallizzazione sensibile
Nominativo studente: Antonella Galati
Periodo di attività: Dal: 04/2015 Al: 03/2016

Denominazione struttura: CNR – Istituto di Cristallografia

Attività svolta: Tutor aziendale per tirocinio post-lauream, finanziato da Italia Lavoro S.p.A
Nominativo studente: Valentina Mirabelli
Periodo di attività: Dal: 08/01/2014 Al: 01/07/2014

Denominazione struttura: Consiglio Interclasse di Fisica, Università degli Studi di Bari
Attività svolta: Tutor per tesi di laurea specialistica, aa 2009/2010
Tipologia di tesi: Laurea specialistica in Fisica in Analisi e Trattamento Dati
Titolo tesi: Riconoscimento di alfa eliche da dati di diffrazione di cristalli proteici
Nominativo studente: Domenica Dibenedetto
Periodo di attività: Dal: 01/12/2009 Al: 30/06/2010

Denominazione struttura: Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Bari
Attività svolta: Attività di co-tutela per tesi di dottorato, relativa al dottorato di ricerca in Sintesi Chimica ed Enzimatica Applicata della Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Bari, ed in particolare alla attività di ricerca presso il laboratorio di cristallografia dell'Istituto di Cristallografia di Bari
Tipologia di tesi: Tesi sperimentale, redatta in lingua inglese, per il XXIV ciclo di Dottorato
Titolo tesi: X-ray studies of metal ion interaction with proteins involved in proteolytic pathways
Nominativo studente: Benny Danilo Belviso
Periodo di attività: Dal: 01/10/2009 Al: 31/12/2011

Commissioni di Dottorato:

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari
Sede: Bari
Attività svolta: Curatore per l'attività di dottorato di Maria Varsalona, iscritta alla Scuola di Dottorato in Scienze Chimiche e Molecolari del Dipartimento di Chimica, XXXVI ciclo.
Periodo di attività: Dal: 10/11/2021 Al 10/11/2023

Denominazione struttura: Università degli Studi di Bari
Sede: Bari
Attività svolta: Valutatore esterno della tesi di dottorato di Mariaclara Iaselli, dal titolo "Development of a fluorescent probe targeting COX-1 for fluorescence image-guided surgery (FIGS) in Ovarian Cancer", per l'ammissione all'esame finale del Dottorato in Scienze Biomolecolari, Farmaceutiche e Mediche, con una tesi dal titolo
Periodo di attività: Dal: 15/06/2020 Al: 30/06/2020

Denominazione struttura: Dipartimento di Scienze e Innovazione Tecnologia dell'Università del Piemonte Orientale "Amedeo Avogadro"
Attività svolta: Correlatore per tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche di Mattia Lopresti
Periodo di attività: Dal: 10/2016 Al: 10/2017

Denominazione struttura: Dipartimento di Fisica dell'Università de La Laguna
Sede: Tenerife (Spagna)
Attività svolta: Membro della commissione per l'assegnazione del titolo di PhD a Jesús Iván da Silva Gonzáles, dottorando del Dipartimento di Fisica dell'Università de La Laguna, che discuteva una tesi dal titolo "Last advances in crystal structure solving from powder diffraction data".
Periodo di attività: Dal: 01/10/2006 Al: 08/10/2006

Ha trascorso i seguenti periodi di studio e ricerca all'estero:

Periodo di short-term mobility finanziato dal CNR, svolto presso la California University of San Francisco, USA, dal 3 al 24 febbraio 2020, per condurre il programma di ricerca dal titolo "Protein crystal structure investigations powered by diffuse scattering", ospite del Prof. James Fraser.

Visiting scientist presso la Kyungpook National University, Daegu, Corea del Sud, dal 16 ottobre al 4 novembre 2016 e dal 19 novembre al 7 dicembre 2017, nell'ambito del progetto bilaterale CNR-NRF dal

titolo "Static and dynamic crystallographic investigations for developing specific and selective inhibitors for the epigenetic therapy of cancers", ospite del Prof. Eric di Luccio.

Visiting scientist presso il Medical Research Center dell'Accademia Polacca delle Scienze, Varsavia, Polonia, dal 2 al 9 novembre 2014 e dal 28 novembre all'11 dicembre 2016, nell'ambito del progetto bilaterale CNR-PAS dal titolo "New algorithms for protein dynamics studies and their applications to protein crystallography", ospite del Prof. Bogdan Lesyng.

Periodo di short-term mobility finanziato dal CNR, svolto presso il National Synchrotron Light Source II del Brookhaven National Laboratory (Brookhaven, New York, Stati Uniti), dal 5 al 25 luglio 2016, per condurre il programma di ricerca dal titolo "Characterization of nanomaterials by Modulation Enhanced Diffraction", ospite del Dr. Eric Dorhyee.

Periodo di short-term mobility finanziato dal CNR, svolto presso il National Synchrotron Light Source II del Brookhaven National Laboratory (Brookhaven, New York, Stati Uniti), dal 17 luglio all'8 agosto 2014, per condurre il programma di ricerca dal titolo "Indagine strutturale dinamica di processi catalitici, fisici o chimici attraverso la tecnica della Modulation Enhanced Diffraction", ospite del Dr. Eric Dorhyee.

Visiting scientist presso la German Research School for Simulation Sciences di Julich, effettuata dal 28 agosto al 4 settembre 2012, per svolgere attività di ricerca sulla biofisica computazionale, ospite del Prof. Paolo Carloni.

Short Visit Grant finanziato dalla European Science Foundation per svolgere attività di ricerca dal titolo "Investigation on mutations in prion protein", condotto presso la German Research School for Simulation Sciences di Julich, Germania, 16-30 ottobre 2010, in collaborazione con il Prof. Paolo Carloni.

Corso di formazione dal titolo "Experimental aspects of X-ray powder diffraction using Synchrotron Radiation", tenutosi presso l'Istituto Paul Scherrer, Villigen, Svizzera, 20-31 gennaio 2008, nell'ambito del programma di formazione individuale 2007 del CNR. Supervisore Dr. Fabia Gozzo.

Corso di formazione dal titolo "Development of crystallographic methods for structural biology", condotto presso il laboratorio di biologia strutturale dell'Università di York, Inghilterra, dal 15 febbraio al 2 marzo 2005, nell'ambito del programma di formazione individuale 2004 del CNR. Supervisore Dr. Garib Murshudov.

Attività di ricerca presso il Centro Europeo per la Ricerca Nucleare (CERN) di Ginevra, condotta dal 1997 al 1999, per partecipare a esperimenti di fisica ad alta energia.

Attività di formazione:

stages di formazione:

"Experimental aspects of powder X-ray diffraction using synchrotron radiation", svolto presso il Paul Scherrer Institute, Villigen, Svizzera, dal 20 al 31 gennaio 2008, nell'ambito del programma di formazione individuale 2007 del CNR.

"Sviluppo di metodi cristallografici per la biologia strutturale", svolto presso lo Structural Biology Laboratory dell'Università di York, Inghilterra, dal 15 Febbraio al 2 Marzo 2005, nell'ambito del programma di formazione individuale 2004 del CNR.

"Applicazione della tecnica del molecular replacement per la soluzione di proteine globulari", svolto presso il Dipartimento di Chimica Organica dell'Università di Padova in due periodi: 31 marzo -12 aprile 2003, e 15-20 gennaio 2007, nell'ambito del programma di formazione individuale 2002 del CNR.

Corsi:

Corso di formazione INPS valore P.A. 2018, dato titolo "La comunicazione interculturale: Progettazione, Gestione e Valutazione", organizzato dal Dipartimento di Scienze Politiche dell'Università degli studi di Bari Aldo Moro e seguito durante l'anno accademico 2018/2019.

“La domanda e l’offerta di ricerca: un confronto con gli esponenti industriali”, tenutosi a Roma dal 24 al 26 settembre 2013 (durata di 16 ore), organizzato dal Dipartimento Scienze Chimiche e Tecnologie dei Materiali.

“Introduzione a Mathematica™”, tenutosi presso il laboratorio di informatica dell’ITCS “Vivante” di Bari dal 14 al 15 Marzo 2002.

“Programmazione ad oggetti in Java e C++”, tenutosi presso la Sezione di Bari dell’INFN nel periodo dal 17 marzo al 26 luglio 2000.

“C++ for Particle Physicists”, tenutosi al CERN nel marzo 1999, per un totale di 12 ore. Rif. Attestato di partecipazione, firmato dal capo dei servizi educativi del CERN, W. Blair.

“Comunicazione attraverso Internet – Linguaggio HTML”, tenutosi presso la Sezione di Bari dell’INFN dal 14 al 18 luglio 1997.

Scuole:

Scuola dell’Associazione Italiana di Cristallografia dal titolo “Synchrotron Light and X-rays: Theory and Applications”, tenutasi a Trieste dal 20 al 21 luglio 2003.

Scuola dell’Associazione Italiana di Cristallografia dal titolo “Il Problema della Fase in Cristallografia: Teoria e Applicazioni”, tenutasi a Bressanone dal 23 al 24 settembre 2002.

VI serie delle “Giornate di Studio sui Rivelatori”, tenutasi a Villa Gualino, Torino dal 20 al 22 febbraio 1996.

“IX Seminario di Fisica Nucleare e Subnucleare”, tenutosi a Serra degli Alimini, Otranto dal 23 al 28 settembre 1996.

“Scuola di Cristallografia Sperimentale”, tenutasi a Monterotondo, Area di Ricerca di Roma dal 6 al 10 novembre 1995.

Attività organizzativa:

Ha organizzato i seguenti eventi scientifici:

la “SILS Conference 2025”, tenutasi a Cagliari (9-11 Settembre 2025) (<https://sites.google.com/view/sils2025/>). Membro del comitato scientifico;

il workshop “ISSMC incontra IC”, tenutosi in maniera virtuale (20 febbraio 2025). (<https://registrazioneeventi.cnr.it/event/104/>);

la “SILS Conference 2024”, tenutasi a Rende (5-7 Settembre 2024) (<https://sites.google.com/view/sils2024/>). Membro del comitato scientifico;

la “SILS Conference 2023”, tenutasi a Roma (30 agosto-1 settembre 2023) (<https://www.ba.ic.cnr.it/sils2023/>). Membro del comitato scientifico. Ha anche partecipato come relatore con un contributo dal titolo “Structural characterization of flexible proteins by SAXS complemented with advanced computational modelling”;

il “Joint Workshop IC-IBIOM”, tenutosi a Bari (18 Aprile 2023) (<https://eventi.mlib.ic.cnr.it/event/44/>);

il “4th Italian Crystallographic Association Biological MacroMolecules Group Meeting”, tenutosi a Fiesole (5-6 Giugno 2023). Membro del comitato scientifico e organizzatore (<http://www.congressi.unisi.it/aicbmm/>);

la scuola internazionale “Protein structure models, biophysical data and high-performance computing for drug design” per conto della Associazione Italiana di Cristallografia, tenutasi a Trieste (7-10 Settembre 2022). Membro del comitato scientifico (<https://school2022.cristallografia.org/>);

il “3rd Italian Crystallographic Association Biological MacroMolecules Group Meeting”, tenutosi a Fiesole (23-24 Maggio 2022). Membro del comitato scientifico e organizzatore;

la "1st Conference on Crystallography, Structural Chemistry and Biosystems", tenutasi a Catania (4-6 Ottobre 2021). Membro del comitato scientifico (<http://www.ic.cnr.it/ic4/en/cscb-committees/>). Ha anche partecipato come relatore con un contributo dal titolo "Structural basis for inhibition of copper trafficking by platinum anticancer drugs";

il "2nd Italian Crystallographic Association Biological Macromolecules Group Meeting", tenutosi in maniera virtuale (7-9 Giugno 2021). Membro del comitato scientifico e organizzatore (<http://www.congressi.unisi.it/icameeting/>);

il XLVII Congresso Nazionale della Divisione Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana, tenutosi a Bari (9-12 settembre 2019). Membro del comitato organizzatore (<http://inorganica2019.ic.cnr.it/index.php/organizzazione-comitato-segreteria/>);

il "EXPO & more International Workshop", tenutosi a Bari (30 settembre-3 ottobre 2019). Membro del comitato organizzatore (<http://www.ba.ic.cnr.it/expo-more-workshop2019/committees/>);

la "3rd International Conference on Applied Mineralogy & Advanced Materials", tenutasi a Bari (24-26 luglio 2018);

la "3rd International Conference on Food & Beverage Packaging", tenutasi a Roma (16-18 luglio 2018). Membro del comitato organizzativo;

il seminario "Analisi quantitative di fasi cristalline: metodi tradizionali e chemiometria a confronto", tenutosi a Bologna (6 febbraio 2018);

il seminario "Metodi multivariati di DOE e PCA in scienza dei materiali e cristallografia", tenutosi a Vercelli (14 settembre 2015);

la sessione "Crystal structure solution by single crystal data" dello "International EXPO/SIR workshop", tenutosi a Bari (10-13 giugno 2014). Membro del comitato scientifico e organizzatore;

l'incontro "La Biologia Strutturale in Puglia: stato dell'arte e prospettive future", tenutosi a Bari (9 luglio 2010);

la sessione "Macromolecular crystal structure solution via AB-INITIO, SIR-MIR, SAD-MAD and MOLECULAR REPLACEMENT techniques" del "PHARE 2009: A modular workshop on global PHASE RETrivial", tenutosi a Martina Franca (TA) (20-22 aprile 2009).

il corso "Computational Structural Biology" tenutosi a Bari dal 27 al 30 settembre 2009 per il corso di dottorato in Fisica dell'Università di Bari.

E' stato chair delle seguenti sessioni di conferenze:

Microsimposio MS1 "Energy: battery and solar cells, electrochemistry" della "SILS Conference 2025", tenutasi a Cagliari (9-11 Settembre 2025) (<https://sites.google.com/view/sils2025/>).

Microsimposio MS4 "Synchrotron and XFEL radiation for life and environmental science" della "SILS Conference 2024", tenutasi a Rende (5-7 Settembre 2024) (<https://sites.google.com/view/sils2024/>).

Microsimposio MS6 "Advanced data analysis methodologies" della "SILS Conference 2023", tenutasi a Roma (30 agosto-1 settembre 2023) (<https://www.ba.ic.cnr.it/sils2023/>).

Sessione 3 della "1st Conference on Crystallography, Structural Chemistry and Biosystems", tenutasi a Catania (4-6 Ottobre 2021) (<http://www.ic.cnr.it/ic4/en/cscb-tentative-program/>).

Sessione "Protein structure and function" del "Annual Meeting of the Bioinformatics Italian Society", tenutosi in maniera virtuale (1-2 Luglio 2021). (<https://bioinformatics.it/bits2021/>). Rif.: stampa del programma della conferenza.

Sessione "Cool & hot structures – Difficult Cases – Disordered Proteins" del "2nd Italian Crystallographic Association Biological Macromolecules Group Meeting", tenutosi in maniera virtuale (7-9 Giugno 2021). (<http://www.congressi.unisi.it/icameeting/programma/>).

Sessione "Biomolecular Crystals" della "The 2nd International Online Conference on Crystals", tenutasi in maniera virtuale (10-20 Novembre 2020). (https://iocc_2020.sciforum.net/)

Sessione dedicata al programma RootProf dell' "EXPO&more International workshop", tenutosi a Bari (30 settembre-3 ottobre 2019);

Microsimposi "The Universe of Materials & Minerals", "Hybrid materials for efficient enzymatic catalysis" e "In situ and in operando structural characterization of nano and micro materials" della "3rd International Conference on Applied Mineralogy & Advanced Materials", tenutasi a Bari (24-26 luglio 2018);

Microsimposio "From APIs to nanocarriers to target macromolecules: a multiscale and multitechnique approach to modern medicine"; del XLVI congresso dell'Associazione Italiana di Cristallografia, tenutosi a Perugia (26-29 giugno 2017). E' stato membro del comitato scientifico della conferenza;

Sessione " Theory and modeling of soft materials " del workshop "Probing Dynamic Processes in Soft Materials Using Advanced Light Sources", tenutosi a Santa Fe (USA) (25-27 luglio 2016);

Sessione "Automated Data Processing and Structural Solution for High Throughput Crystallography" del "XXII International Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography" tenutasi a Madrid (22-30 agosto 2011);

Sessione sulla biologia strutturale computazionale della conferenza nazionale "Modelling Winter 2008", tenutasi a Pisa (18 dicembre 2008).

Attività di divulgazione:

Keynotes:

"25th General Assembly and Congress of the International Union of Crystallography", tenutosi a Praga, Repubblica Ceca (14-22 Agosto 2021), con un contributo dal titolo "Multivariate analysis of X-ray diffraction and XAFS data".

"Fifth Meeting of the Italian (AIC) and Spanish Crystallographic (GE3C) Associations (MISCA V)", tenutosi a Napoli (4-7 settembre 2019), con un contributo dal titolo "Protein crystallization in hydrogel composite membranes and deep eutectic solvents".

"3rd Joint AIC-SILS Conference", tenutasi a Roma (25-28 giugno 2018), con un contributo dal titolo "New methods and applications for in situ characterization of structural dynamics".

"29th European Crystallographic Meeting", tenutosi a Rovigno, Croazia (23-28 agosto 2015), con un contributo dal titolo "Methods for extracting and combining information from different datasets".

Contributi su invito:

"In situ/operando characterization of materials by X-ray diffraction: from theory to applications" al workshop "Digital twins" organizzato nell'ambito del congresso "Nanoinnovation 2025", tenutosi a Roma (15-19 settembre 2025),

"Structural basis of metal ion trafficking in lysosome" al congresso "The 3rd International Online Conference on Crystals", tenutosi in maniera virtuale (15-30 gennaio 2022).

"Methods for Structural Characterization of Catalytic Processes" alla "V International Conference on Catalysis and Chemical Engineering (CCE-2022)" tenutasi in maniera virtuale (22-26 febbraio 2021)..

"Enzymes and advanced materials for active food packaging" alla "3rd International Conference on Food & Beverage Packaging", tenutasi a Roma. (16-18 luglio 2018).

"Structural Dynamics by Modulated Enhanced Diffraction" al workshop "Matter-Radiation Interactions in Extremes (MaRIE)", tenutosi a Santa Fe, USA (25-27 luglio 2016).

"Modulation enhanced diffraction: theory and applications" al "Annual meeting of the American Crystallographic Association", tenutosi a Honolulu, Hawaii, (20-24 luglio 2013).

“Data Analysis by Modulation Enhanced Diffraction (MED)” al “workshop intitolato “NSLS-II First Experiments”, tenutosi al Brookhaven National Laboratory (12-13 agosto 2013).

“Data Analysis by Modulation Enhanced Diffraction (MED)” al “workshop intitolato “Advanced analysis of X-ray and neutron scattering data: getting from data to science”, tenutosi al Brookhaven National Laboratory (14-15 agosto 2013).

“Selective structural investigation by MED” al “NSLS-II First-Experiments Workshop”, tenutosi al Brookhaven National Laboratory (12-13 agosto 2013).

“Modulated Enhanced Diffraction: la nuova sfida” al workshop “Davide Viterbo: una vita per la cristallografia...ma non solo” tenutosi ad Alessandria (19 dicembre 2012).

“New tools for flexibility assessment of protein structures” al congresso “Computationally Driven Drug Discovery” organizzato da Dompè S.p.A., tenutosi a L’Aquila (21-23 novembre 2011).

“Extrapolation of structure factors in ab-initio techniques” al “PHARE: a modular workshop on PHase REtrival”, tenutosi a Martina Franca (TA) (21 aprile 2009).

“Molecular replacement in IL MILIONE” al workshop “Recent Advances in Macromolecular Crystallography”, tenutosi a Copanello di Staletti (CZ), (23-24 settembre 2007).

Contributi orali a congressi internazionali di notevole rilevanza:

“In situ/Operando Advanced Structural Characterization of smart materials for alternative energies” al “Giornate scientifiche 2025 del CNR-DCSCTM”, tenutosi a Bologna dal 21 al 23 ottobre 2025.

"Structural characterization of the full-length anti-CD20 antibody rituximab by SAXS data and advanced computational modelling" al "3rd Italian Crystallographic Association Biological Macromolecules Group Meeting", tenutosi a Fiesole (23-24 maggio 2022).

"Structural, morphological & biological characterizations of mAbs crystals obtained at different scale" al "3rd Review Meeting - AMECRYS Project", tenutosi a Bruxells in maniera virtuale (20 Maggio 2021). Si tratta del meeting di chiusura del progetto FETOPEN denominato AMECRYS (<http://www.amecrys-project.eu/>), organizzato commissione di valutazione del progetto. Ha presentato le attività svolte nell'ambito del WorkTask 5.3, di cui è stato coordinatore.

"Structural characterization of halide perovskites by X-ray measurements and advanced analysis" al XLVII Congresso Nazionale della Divisione Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana, tenutosi a Bari (9-12 settembre 2019).

"Multivariate analysis for in situ characterization of structural dynamics" alla "14th Biennial Conference on High Resolution X-ray Diffraction and Imaging - XTOP 2018", tenutasi a Bari dal 3 al 7 settembre 2018.

"Static and dynamic characterization of structural changes in vapochromic compounds" alla "15th European Powder Diffraction Conference - EPDIC15", tenutasi a Bari dal 12 al 15 giugno 2016.

"Platinum binding to human copper chaperone Atox1" al "BIOMET15 - XV workshop farmacometallics", tenutosi a Bari dal 23 al 24 ottobre 2015.

“Structural evolution of tungsten oxide nanocrystals investigated by Pair Distribution Function and Modulation Enhanced Diffraction” al “XLIV Annual Meeting of the AIC”, tenutosi a Vercelli dal 14 al 18 settembre 2015.

"Characterization of plant biomass derived black carbon (biochar) as soil amendment by X-ray powder diffraction" alla "22nd European Biomass Conference and Exhibition", tenutasi ad Amburgo dal 23 al 26 giugno 2014.

"Structural Investigation Of Protein Z Mutations Within The Exon 8" al "XXII Congresso della Società Italiana Studio Emostasi e Trombosi - Siset", tenutosi a Vicenza dal 4 al 6 Ottobre 2012.

"IL MILIONE: a package for protein crystal structure determination" al "2nd Meeting of the Spanish-Italian Crystallographic Associations - MISCA II", tenutosi a Oviedo dal 30 giugno al 3 luglio 2010.

"New computing strategies for protein structure determination by X-ray crystallography" al convegno "XXXVIII CONGRESSO AIC - Associazione italiana cristallografia", tenutosi a Salerno dal 20 al 23 settembre 2009.

"Phasing at resolution higher than the experimental one" al "XX Congress of the International Union of Crystallography", tenutosi a Firenze (23-31 agosto 2005).

"The Patterson deconvolution method for the ab-initio structure solution of large proteins" al "23rd European Crystallographic Meeting ECM-23", tenutosi a Leuven (Belgio), dal 26 al 31 agosto 2004. Nel corso della conferenza ha anche svolto una sessione pratica sull'utilizzo del programma IL MILIONE.

"Solution of organic structures from powder diffraction data by simulated annealing using the electron density map information" al "XXXII Convegno Nazionale dell'Associazione Italiana di Cristallografia", tenutosi a Bressanone, Bolzano, dal 24 al 27 settembre 2002.

"Simulation of the response of the NA57 silicon pixel detector" alla conferenza "Pixel 2000", tenutasi a Genova dal 5 all'8 giugno 2000.

"Phasing at resolution higher than the experimental one" al "XX Congress of the International Union of Crystallography", tenutosi a Firenze (23-31 agosto 2005).

"Lambda, Xi and Omega production at central rapidity in p-Pb and Pb-pb collisions at 158 A GeV/c" al "Forth International Conference "Strangeness in Quark Matter", tenutosi a Padova (20-24 luglio 1998).

"Strange and multi-strange baryon production at SPS as a probe of QGP formation" alla "7th Conference on the Intersections of Particle and Nuclear Physics", tenutasi a Quebec City, Quebec (Canada) (22-28 maggio 2000).

"Strange particle production in WA97" al "Rencontres de Moriond – QCD and High Energy Hadronic Interactions", tenutosi a Les Arcs (France) (21-27 marzo 1998). Contributo dal titolo "Lamba, Xi and Omega production in Pb-Pb and p-Pb interactions at 158 A GeV/c" pubblicato nel libro dei proceedings "98 QCD and High Energy Hadronic Interactions", edited by J. Tran Thanh Van, Editions Frontieres (1998) p.565-570, ISBN 2-86332-243-5.

Seminari presso istituzioni di ricerca:

"Multivariate analysis for structural characterization of materials by situ X-ray diffraction" tenuto al Los Alamos National Laboratory, USA (20 febbraio 2020).

"Multivariate analysis for in situ characterization of structural dynamics", tenuto al Nanochemistry Department dell'Istituto Italiano di Tecnologia (IIT), Genova (18 ottobre 2019).

"La cristallografia come metodo di indagine strutturale di macromolecole biologiche e materiali avanzati", tenuto presso l'Accademia Pugliese delle Scienze and the Accademia dei Georgofili, Sezione del Sud-Est, Bari (30 maggio 2018).

"Structural investigation of macromolecules by x-ray: theoretical background and applications", tenuto al Creative BioResearch Group & Advanced Bio-resource Research Center of the Kyungpook National University, Daegu, South Korea (30 novembre 2017).

"Structural dynamics by Modulated Enhanced Diffraction", tenuto al Photon Science Division of the Brookhaven National Laboratory (20 luglio 2016)

"New tools and techniques for investigating protein structural dynamics" tenuto al Department of genetic engineering of the Kyungpook National University (27 ottobre 2016).

"New tools and techniques for investigating protein structural dynamics", tenuto al Institute of Biophysics and Biochemistry of the Polish Academy of Sciences (30 November 2016).

"Advances in methods for macromolecular crystal structure solution", tenutosi al Faculty of Physics, University of Warsaw (7 novembre 2016).

"New algorithms for protein dynamics studies and their applications to protein crystallography", tenuto al Institute of Biophysics and Biochemistry of the Polish Academy of Sciences (5 novembre 2014).

“New trends in Modulation Enhanced Diffraction”, tenuto al Brookhaven National Laboratory, USA, nell’ambito dei Photon Sciences Friday Lunchtime seminars (1 agosto 2014).

“Produzione di particelle strane nell’esperimento WA97”, tenutosi all’ Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, sede di Bari (28 maggio 1998).

Esperimenti al sincrotrone:

E’ stato responsabile dei seguenti esperimenti di Cristallografia svolti presso sorgenti di luce di sincrotrone (la proposta di esperimento è selezionata da comitati di valutazione organizzati dalle sorgenti di luce di sincrotrone).

Titolo: ITABAG: Crystallographic investigations on macromolecules for a structure-based approach to One Health

Sincrotrone: ESRF (Grenoble, FR), MX beamlines.

Ruolo: Principal Investigator.

Data: dal 2025 ad oggi

Proposal: BAG time proposal n. 2749 (2025).

Titolo: Structure-based optimization of metal-organic frameworks (MOFs) for green energy applications

Sincrotrone: ESRF (Grenoble, FR), beamline: BM31.

Ruolo: Principal Investigator.

Data: 2025

Proposal: n.EV-648

Titolo: Structural investigation on nanomaterials for hydrogen production and storage

Sincrotrone: NSLS-II (Brookhaven, USA), beamline: 28-ID-2.

Ruolo: Principal Investigator.

Data: 2023-2024

Proposal: n.312211

Titolo: Structural investigation on inorganic perovskite clusters and novel perovskite-related Lead Sulphide-Halide nanocrystals

Sincrotrone: NSLS-II (Brookhaven, USA), beamline: 28-ID-2.

Ruolo: Principal Investigator.

Data: 2021-2022

Proposal: n.306063

Titolo: ITABAG: 3D structures of macromolecules related to human health

Sincrotrone: ESRF (Grenoble, FR), MX beamlines.

Ruolo: Co-proposer. Responsabile attività dell’Istituto di Cristallografia, sede di Bari.

Data: dal 2020 al 2024

Proposal: BAG time proposal n. 2291 (2020), n.2363 (2021), n.2464 (2022), n.2537 (2023), n.2658 (2024)

Titolo: Italian CryoEM Bag (ICB)

Sincrotrone: ESRF (Grenoble, FR), CryoEM facilities.

Ruolo: Co-proposer. Responsabile attività dell’Istituto di Cristallografia, sede di Bari.

Data: da 2020 a oggi

Proposal: BAG time proposal n. 2262 (2020), n.2368 (2021), n.2442 (2022), n.2597 (2024), n.2705 (2025), n.2776 (2026)

Titolo: Structural and mechanistic studies on proteins involved in various human diseases.

Sincrotrone: DIAMOND (Didcot, UK), beamlines I02, I03, I04, I04-1, I24, B21

Ruolo: Co-proposer. Responsabile attività dell'Istituto di Cristallografia, sede di Bari.

Data: dal 2020 al 2023

Proposal: BAG time proposal n.11216 (2014), n.8574 (2015-2016), n.11690 (2016-2017), n.15832 (2017-2018), n.21741 (2020-2021), n.29907 (2022).

Titolo: Structural and mechanistic studies on different proteins related to diseases.

Sincrotrone: DIAMOND (Didcot, UK), beamlines I02, I03, I04, I04-1, I24, B21

Ruolo: Co-proposer. Responsabile attività dell'Istituto di Cristallografia, sede di Bari.

Proposal: BAG time proposal n.11216 (2014), n.8574 (2015-2016), n.11690 (2016-2017), n.15832 (2017-2018).

Titolo: Understanding the 3D structure of a variety of proteins related to the human health

Sincrotrone: ESRF (Grenoble,FR), MX beamlines.

Ruolo: Co-proposer. Responsabile attività dell'Istituto di Cristallografia, sede di Bari.

Data: 2012-2019

Proposal: BAG time proposal n. 1418 (2012), n.1552 (2013), n.1640 (2014), n.1750 (2015), n.1841 (2016), n.1949 (2017), n.2075 (2018).

Titolo: Structural dynamic investigation of the thermal treatment of palygorskite–indigo to produce Maya Blue

Sincrotrone: NSLS-II (Brookhaven, USA), beamline: 28-ID1.

Ruolo: Principal Investigator.

Data: 18-20 luglio 2016

Proposal: n.300931

Titolo: Dynamic investigation of light-induced structural changes in hybrid organic–inorganic MAPbI₃ perovskite

Sincrotrone: NSLS-II (Brookhaven, USA), beamline: 28-ID1.

Ruolo: Principal Investigator

Data: 24-25 luglio 2016

Proposal: n.301262

Titolo: Modulated Enhanced Diffraction applied to structure-based drug design.

Sincrotrone: ESRF (Grenoble, FR), beamline: BM01A.

Ruolo: Principal Investigator

Data: 21-23 gennaio 2015

Proposal: n. LS-2333.

Titolo: Structural Characterization of Vapochromic Compounds

Sincrotrone: NSLS (Brookhaven, USA), beamline 11-BM.

Ruolo: Principal Investigator

Data: 20-30 luglio 2014

Proposal: Rapid access proposal n.40896

Titolo: Characterization of the Chromium(VI) reduction process by biomolecules.

Sincrotrone: ESRF (Grenoble, FR), beamline: ID26.

Ruolo: Principal Investigator

Data: 18-25 novembre 2014

Proposal: n EV-83.

Titolo: Characterization of dimer conformation of the human copper chaperone Atox1.

Sincrotrone: DIAMOND (Didcot, UK), beamline: B21.

Ruolo: Principal Investigator

Data: 2 dicembre 2014

Proposal: n. SM12073

Titolo: Studies on absorption enhancement of photosynthetic Reaction Centre
Sincrotrone: DIAMOND (Didcot, UK),
Ruolo: Principal Investigator
Data: 14 dicembre 2012
Proposal: MX Rapid Access Proposal n.5892

Titolo: Structural study of metal binding to human Ubiquitin
Sincrotrone: ELETTRA (Trieste, IT)
Ruolo: Principal Investigator
Data: 19 marzo 2011
Proposal: n. 20105203

Ha partecipato ai seguenti esperimenti di Cristallografia svolti presso sorgenti di luce di sincrotrone:

Sincrotrone: ALS (Berkeley, USA), beamline:8.3.1
Data: 14 febbraio 2020
Beamtime of Prof. James Fraser (University of California San Francisco) group.

Sincrotrone: PAL (Pohang, Corea del Sud), beamline 7A
Data: 20 ottobre 2016
Beamtime of Prof. Eric di Luccio (Kyungpook National University Daegu) group.

Titolo: The proof of principle of Modulated Enhanced Diffraction theory by application to thermal motion variations
Sincrotrone: ESRF (Grenoble, FR), beamline: BM01A
Data: 19-23 luglio 2013
Proposal: n. 1113

Prodotti della ricerca:

Ha depositato nel Protein Data Bank le seguenti nuove strutture cristalline di macromolecole biologiche:

- 7ZC3: Crystal structure of human copper chaperone Atox1 bound to zinc ion by CxxC motif (Mangini, V., Belviso, B.D., Arnesano, F., Caliendo, R.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb7ZC3/pdb>
- 7BB1: Lysozyme crystallized in the presence of the hydrated deep eutectic solvent Choline chloride-Glutamic acid 2:1 (Belviso, B.D., Caliendo, R., Carrozzini, B.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb7BB1/pdb>
- 7BAZ: Lysozyme crystallized in the presence of the hydrated deep eutectic solvent Choline chloride-Glycerol 1:2 (Belviso, B.D., Caliendo, R., Carrozzini, B.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb7BAZ/pdb>
- 7B9J: Lysozyme crystallized in the presence of the hydrated deep eutectic solvent Choline chloride-Urea 1:2 (Belviso, B.D., Caliendo, R., Carrozzini, B.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb7B9J/pdb>
- 7OBF: Crystal structure of the human VH antibody domain HEL4 (Belviso, B.D., Caliendo, R., Carrozzini, B.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb7OBF/pdb>
- 6Y3C: Human COX-1 Crystal Structure. (Miciaccia, M., Belviso, B.D., Iaselli, M., Ferorelli, S., Perrone, M.G., Caliendo, R., Scilimati, A.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb6Y3C/pdb>
- 6TTO: Crystal structure of a potent and reversible dual binding site Acetylcholinesterase chiral inhibitor. (de la Mora, E., Mangiatordi, G.F., Belviso, B.D., Caliendo, R., Colletier, J.P., Catto, M.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb6TTO/pdb>
- 6QUF: Protein crystallization by ionic liquid hydrogel support: reference crystal of glucose isomerase grown on standard silanized glass. (Belviso, B.D., Caliendo, R., Caliendo, Rosanna). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb6QUF/pdb>

- 6QUK: Protein crystallization by ionic liquid hydrogel support: glucose isomerase grown by using ionic liquid hydrogel. (Belviso, B.D., Caliandro, R., Caliandro, Rosanna). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb6QUK/pdb>
- 6TOV: Crystal Structure of Teicoplanin Aglycone. (Belviso, B.D., Carrozzini, B., Caliandro, R., Altomare, C.D., Bolognino, I., Cellamare, S.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb6TOV/pdb>
- 6EO8: Crystal structure of thrombin in complex with a novel glucose-conjugated potent inhibitor. (Belviso, B.D., Caliandro, R., Aresta, B.M., De Candia, M., Altomare, C.D.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb6EO8/pdb>
- 6EO9: Crystal structure of thrombin in complex with a novel glucose-conjugated potent inhibitor. (Belviso, B.D., Caliandro, R., Aresta, B.M., De Candia, M., Altomare, C.D.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb6EO9/pdb>
- 5T7L: Pt(II)-mediated copper-dependent interactions between ATOX1 and MNK1. (Caliandro, R., Mirabelli, V., Caliandro, Rosanna, Rosato, A., Lasorsa, A., Galliani, A., Arnesano, F., Natile, G.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb5T7L/pdb>
- 5H6Z: Crystal structure of Set7, a novel histone methyltransferase in Schizosaccharomyces pombe. (Mevius, D.E.H.F., Shen, Y., Morishita, M., Carrozzini, B., Caliandro, R., di Luccio, E.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb5H6Z/pdb>
- 5WW0: Crystal structure of Set7, a novel histone methyltransferase in Schizosaccharomyces pombe. (Mevius, D.E.H.F., Shen, Y., Morishita, M., Carrozzini, B., Caliandro, R., di Luccio, E.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb5WW0/pdb>
- 4DPE: Structure of MMP3 complexed with a platinum-based inhibitor. (Belviso, B.D., Arnesano, F., Calderone, V., Caliandro, R., Natile, G., Siliqi, D.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb4DPE/pdb>
- 4G9L: Structure of MMP3 complexed with NNGH inhibitor. (Belviso, B.D., Arnesano, F., Calderone, V., Caliandro, R., Natile, G., Siliqi, D.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb4G9L/pdb>
- 4JA1: Structure of MMP3 complexed with a platinum-based inhibitor. (Belviso, B.D., Arnesano, F., Calderone, V., Caliandro, R., Natile, G., Siliqi, D.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb4JA1/pdb>
- 4QOT: Crystal structure of human copper chaperone bound to the platinum ion. (Belviso, B.D., Galliani, A., Caliandro, R., Arnesano, F., Natile, G.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb4QOT/pdb>
- 3N30: Crystal Structure of cubic Zn³-hUb (human ubiquitin) adduct. (Siliqi, D., Caliandro, R., Arnesano, F., Natile, G., Falini, G., Fermani, S., Belviso, B.D.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb3N30/pdb>
- 3N32: The crystal structure of human Ubiquitin adduct with Zeise's salt. (Siliqi, D., Caliandro, R., Arnesano, F., Natile, G., Falini, G., Fermani, S., Belviso, B.D.). PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb3N32/pdb>

Ha depositato nello Small Angle Scattering Biological Data Bank (SASBDB, <https://www.sasbdb.org>) le seguenti nuove strutture di macromolecole biologiche in soluzione:

SASDSF2 – K48-linked diubiquitin

SASDSG2 – K48-linked diubiquitin in the presence of zinc ion

SASDSH2 – K48-linked diubiquitin in the presence of copper (II) ion

SASDMX3 – Anti-CD20 IgG antibody

SASDW74 – Aromatic-L-amino-acid decarboxylase L353P bound to pyridoxal 5'-phosphate (PLP)

SASDW84 – Aromatic-L-amino-acid decarboxylase R347Q bound to pyridoxal 5'-phosphate (PLP)

SASDR89 – Aromatic-L-amino-acid decarboxylase (AADC) - apo form

SASDR99 – Aromatic-L-amino-acid decarboxylase (AADC) - pyridoxal 5'-phosphate bound holo form

SASDRA9 – Aromatic-L-amino-acid decarboxylase (AADC) - dopa methylester DME-bound holo form

SASDNL8 – The C-terminal region of histone-lysine N-methyltransferase NSD3: PWWP2-SET construct

SASDNK8 – The C-terminal region of histone-lysine N-methyltransferase NSD3: SET-PHD4 construct

SASDR89 – Aromatic-L-amino-acid decarboxylase (AADC) - apo form

SASDR99 – Aromatic-L-amino-acid decarboxylase (AADC) - pyridoxal 5'-phosphate bound holo form

SASDRA9 – Aromatic-L-amino-acid decarboxylase (AADC) - dopa methylester DME-bound holo form

Ha depositato nel Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC, <https://www.ccdc.cam.ac.uk>) le seguenti nuove strutture cristalline di piccole molecole:

ICSD 68013. Deposition Number(s): 2315853. Space Group: P 63 (173) Cell: a 15.514Å b 15.514Å c 4.02238Å, α 90° β 90° γ 119.99999999999999 Publication(s):Quarta, Danila, Toso, Stefano, Saleh, Gabriele, Caliandro, Rocco, Moliterni, Anna, Griesi, Andrea, Divitini, Giorgio, Infante, Ivan, Gigli, Giuseppe, Giannini, Cinzia, Manna, Liberato, Giansante, Carlo, Chemistry of Materials, 2023, 35, 1029, DOI: 10.1021/acs.chemmater.2c02941. Deposited on 18/12/2023.

ICSD 68012. Deposition Number(s): 2315852. Space Group: P 3 (143). Cell: a 15.46331Å b 15.46331Å c 8.02163Å, α 90° β 90° γ 119.99999999999999° Publication(s): Quarta, Danila, Toso, Stefano, Saleh, Gabriele, Caliandro, Rocco, Moliterni, Anna, Griesi, Andrea, Divitini, Giorgio, Infante, Ivan, Gigli, Giuseppe, Giannini, Cinzia, Manna, Liberato, Giansante, Carlo, Chemistry of Materials, 2023, 35, 1029, DOI: 10.1021/acs.chemmater.2c02941. Deposited on 18/12/2023.

MINWOZ. Space Group: P 21 21 21 (19) Cell: a 29.719(2)Å b 16.4667(11)Å c 4.6604(3)Å, α 90.000° β 90.000° γ 90.000° Data Citation Gualtiero Milani, Roberta Budriesi, Elisa Tavazzani, Maria Maddalena Cavalluzzi, Laura Beatrice Mattioli, Daniela Valeria Miniero, Pietro Delre, Benny Danilo Belviso, Marco Denegri, Corrado Cuocci, Natalie Paola Rotondo, Annalisa De Palma, Roberta Gualdani, Rocco Caliandro, Giuseppe Felice Mangiatordi, Amit Kumawat, Carlo Camilloni, Silvia Priori, Giovanni Lentini CCDC 2209758: Experimental Crystal Structure Determination, 2023, DOI: 10.5517/ccdc.csd.cc2d5fjk. Deposited in 27/09/2022.

MINWUF. Space Group: P 21/c (14). Cell: a 14.2987(16)Å b 18.4960(19)Å c 9.2033(9)Å, α 90.000° β 102.785(2)° γ 90.000°. Data Citation Gualtiero Milani, Roberta Budriesi, Elisa Tavazzani, Maria Maddalena Cavalluzzi, Laura Beatrice Mattioli, Daniela Valeria Miniero, Pietro Delre, Benny Danilo Belviso, Marco Denegri, Corrado Cuocci, Natalie Paola Rotondo, Annalisa De Palma, Roberta Gualdani, Rocco Caliandro, Giuseppe Felice Mangiatordi, Amit Kumawat, Carlo Camilloni, Silvia Priori, Giovanni Lentini CCDC 2209759: Experimental Crystal Structure Determination, 2023, DOI: 10.5517/ccdc.csd.cc2d5fkl. Deposited on 27/09/2022.

ICSD 205100. Space Group: C c (9), Cell: a 8.920(8)Å b 12.815(8)Å c 7.695(4)Å, α 90.0° β 124.73(2)° γ 90.00°. Data Citation: Stefano Toso, Muhammad Imran, Enrico Mugnaioli, Anna Moliterni, Rocco Caliandro, Nadine J. Schrenker, Andrea Pianetti, Juliette Zito, Francesco Zaccaria, Ye Wu, Mauro Gemmi, Cinzia Giannini, Sergio Brovelli, Ivan Infante, Sara Bals, Liberato Manna CSD 2181723: Experimental Crystal Structure Determination, 2022, DOI: 10.25505/fiz.icsd.cc2c7852. Deposited on 24/06/2022.

ICSD 205101. Space Group: P n m a (62), Cell: a 8.227(6)Å b 15.642(10)Å c 8.248(6)Å, α 90.000° β 90.000° γ 90.000°. Data Citation: Stefano Toso, Muhammad Imran, Enrico Mugnaioli, Anna Moliterni, Rocco Caliandro, Nadine J. Schrenker, Andrea Pianetti, Juliette Zito, Francesco Zaccaria, Ye Wu, Mauro Gemmi, Cinzia Giannini, Sergio Brovelli, Ivan Infante, Sara Bals, Liberato Manna CSD 2181722: Experimental Crystal Structure Determination, 2022, DOI: 10.25505/fiz.icsd.cc2c7841. Deposited on 24/06/2022.

ICSD 205099 Structure. Space Group: P n m a (62), Cell: a 8.178(6)Å b 14.732(9)Å c 8.095(7)Å, α 90.000° β 90.000° γ 90.000°. Data Citation: Stefano Toso, Muhammad Imran, Enrico Mugnaioli, Anna Moliterni, Rocco Caliandro, Nadine J. Schrenker, Andrea Pianetti, Juliette Zito, Francesco Zaccaria, Ye Wu, Mauro Gemmi, Cinzia Giannini, Sergio Brovelli, Ivan Infante, Sara Bals, Liberato Manna CSD 2181721: Experimental Crystal Structure Determination, 2022, DOI: 10.25505/fiz.icsd.cc2c7830. Deposited on 24/06/2022.

ICSD 119551. Space Group: C m c m (63) Cell: a 3.954(8)Å b 13.55(3)Å c 8.791(17)Å, α 90.000000° β 90.000000° γ 90.000000° Data Citation Danila Quarta, Stefano Toso, Antonio Fieramosca, Lorenzo Dominici, Rocco Caliandro, Anna Moliterni, David Maria Tobaldi, Gabriele Saleh, Irina Gushchina, Rosaria Brescia, Mirko Prato, Ivan Infante, Adriano Cola, Cinzia Giannini, Liberato Manna, Giuseppe Gigli, Carlo Giansante CSD 2260259: Experimental Crystal Structure Determination, 2024, DOI: 10.25505/fiz.icsd.cc2fvzlw. Deposited on 24/06/2022.

ICSD 46266: ICSD Structure: (Bi Cl S)n. Space Group: P n m a (62), Cell: a 7.9104(6)Å b 4.0980(3)Å c 9.1398(7)Å, α 90.000° β 90.000° γ 90.000°. Data Citation: Danila Quarta, Stefano Toso, Roberto Giannuzzi, Rocco Caliandro, Anna Moliterni, Gabriele Saleh, Agostina-Lina Capodilupo, Doriana Debellis, Mirko Prato, Concetta Nobile, Vincenzo Maiorano, Ivan Infante, Giuseppe Gigli, Cinzia Giannini, Liberato Manna, Carlo Giansante CSD 2154418: Experimental Crystal Structure Determination, 2022, DOI: 10.25505/fiz.icsd.cc2b9vcw. Deposited on 24/02/2022.

ORIJIL: catena-[bis(μ -cyano)-(μ -aqua)-(2-(pyridin-2-yl)phenyl)-platinum(ii)-potassium]. Space Group: P b c a (61), Cell: a 9.9886(5)Å b 6.7941(4)Å c 38.6467(4)Å, α 90° β 90° γ 90°. Data Citation: Benny Danilo Belviso, Francesco Marin, Sara Fuertes, Violeta Sicilia, Rosanna Rizzi, Fulvio Ciriaco, Chiara Cappuccino, Eric Dooryhee, Aurelia Falcicchio, Lucia Maini, Angela Altomare, Rocco Caliandro CCDC 2033576: Experimental Crystal Structure Determination, 2021, DOI: 10.5517/ccdc.csd.cc26837v. Deposited on 02/04/2021.

Non-CSD Structure. Space Group: F d 3 m (227), Cell: a 24.94919(16)Å b 24.94919(16)Å c 24.94919(16)Å, α 90° β 90° γ 90°. Data Citation: Eleonora Conterposito, Luca Palin, Rocco Caliandro, Wouter van Beek, Dmitry Chernyshov, Marco Milanese CCDC 1884781: Experimental Crystal Structure Determination, 2019, DOI: 10.5517/ccdc.csd.cc2188d0. Deposited on 12/12/2018.

EFISIY: N-[(2E)-3-(4-chlorophenyl)prop-2-en-1-yl]-4-methoxy-N-methylbenzenesulfonamide. Space Group: P 21/c (14), Cell: a 15.040(3)Å b 9.151(6)Å c 13.868(7)Å, α 90° β 116.38(5)° γ 90°. Data Citation: Benedetta Carrozzini, Benny Danilo Belviso, Claudio Bruno, Maria Maddalena Cavalluzzi, Angelo Lovece, Giovanni Lentini, Rocco Caliandro CCDC 1468879: Experimental Crystal Structure Determination, 2019, DOI: 10.5517/ccdc.csd.cc119h6l. Deposited on 02/08/2018.

ATOGEX: cis-(5-(ethoxycarbonyl)-3-hydroxybenzene-1,2-bis(olato))-bis(triphenylphosphine)-platinum(ii). Space Group: P 1 (2), Cell: a 11.0385(4)Å b 12.2694(12)Å c 15.242(2)Å, α 72.526(7)° β 85.165(9)° γ 89.247(9)°. Data Citation: Maria Michela Dell'Anna, Valentina Censi, Benedetta Carrozzini, Rocco Caliandro, Nunzio Denora, Massimo Franco, Daniele Veclani, Andrea Melchior, Marilena Tolazzi, Piero Mastroilli CCDC 1430058: Experimental Crystal Structure Determination, 2016, DOI: 10.5517/ccdc.csd.cc1k02xk. Deposited on 09/03/2016.

ATOGAT: cis-(4-(3,5,7-trihydroxy-4-oxo-4H-1-benzopyran-2-yl)benzene-1,2-bisolato)-bis(triphenylphosphine)-platinum(ii). Space Group: P b n b (56), Cell: a 15.372(4)Å b 22.066(10)Å c 32.445(6)Å, α 90° β 90° γ 90°. Data Citation: Maria Michela Dell'Anna, Valentina Censi, Benedetta Carrozzini, Rocco Caliandro, Nunzio Denora, Massimo Franco, Daniele Veclani, Andrea Melchior, Marilena Tolazzi, Piero Mastroilli CCDC 1430059: Experimental Crystal Structure Determination, 2016, DOI: 10.5517/ccdc.csd.cc1k02yl. Deposited on 09/03/2016.

IYUKAQ: (5-(ethoxycarbonyl)-3-hydroxybenzene-1,2-bis(olato))-bis(triphenylphosphine)-platinum(ii). Space Group: P 1 (2), Cell: a 11.179Å b 13.786Å c 28.155Å, α 101.40° β 93.83° γ 95.64°. Data Citation: Benedetta Carrozzini, Rocco Caliandro, Maria Michela Dell'Anna and Valentina Censi CCDC 1430050: Experimental Crystal Structure Determination, 2016, DOI: 10.5517/ccdc.csd.cc1k02n9. Deposited on 07/10/2015.

CIWQOR: N-(3-((3-fluorobenzyl)oxy)phenyl)-1-(pyridin-4-yl)piperidine-4-carboxamide monohydrate. Space Group: P 1 (2), Cell: a 7.44(4)Å b 10.0(3)Å c 15.12(3)Å, α 98.90(14)° β 101.65(14)° γ 98.80(18)°.

Data Citation: Modesto de Candia, Filomena Fiorella, Gianfranco Lopopolo, Andrea Carotti, Maria Rosaria Romano, Marcello Diego Lograno, Sophie Martel, Pierre-Alain Carrupt, Benny D. Belviso, Rocco Caliandro, Cosimo Altomare CCDC 959986: Experimental Crystal Structure Determination, 2018, DOI: 10.5517/ccdc.csd.cc116y9h. Deposited on 09/09/2013.

FASNOF: (2S)-3-(1H-indol-3-yl)-N-([1-(5-methoxypyridin-2-yl)cyclohexyl]methyl)-2-methyl-2-((4-nitrophenyl)carbamoyl)amino)propanamide. Space Group: P 21 21 21 (19), Cell: a 12.4170(18)Å b 13.8950(8)Å c 17.779(3)Å, α 90.00° β 90.00° γ 90.00°. Data Citation: Antonio Carrieri, Enza Lacivita, Benny Danilo Belviso, Rocco Caliandro, Piero Mastroianni, Vito Gallo, Mauro Niso, Marcello Leopoldo CCDC 891200: Experimental Crystal Structure Determination, 2017, DOI: 10.5517/ccdc.csd.ccyxcdl. Deposited on 10/07/2012.

Ha contribuito a realizzare i seguenti programmi di calcolo cristallografico, distribuiti attraverso il sito web dell'Istituto di Cristallografia (<https://www.ic.cnr.it/software/>). I programmi di calcolo sono distribuiti alla comunità scientifica internazionale richiedendo la firma di un Licence Agreement. Il loro utilizzo è gratuito per istituti di ricerca accademici e senza fini di lucro, mentre richiede il pagamento di un canone di licenza agli utenti commerciali.

IL MILIONE. Pacchetto software per la determinazione della struttura cristallina di bio-macromolecole. Il software è distribuito a partire dal 2006.

SIR2004. Pacchetto software per la determinazione della struttura cristallina di molecole mediante dati di diffrazione da cristallo singolo. Il software è distribuito a partire dal 2004.

EXPO2004. Pacchetto software per la determinazione della struttura cristallina di molecole mediante dati di diffrazione da polveri. Il software è distribuito a partire dal 2004.

ROOTPROF. Pacchetto software l'analisi multivariata di profili unidimensionali. Il software è distribuito a partire dal 2014.

T-PAD. Programma per l'analisi della flessibilità proteica da insiemi di modelli strutturali ottenute mediante dinamica molecolare, NMR o cristallografia. Il software è distribuito a partire dal 2025 .

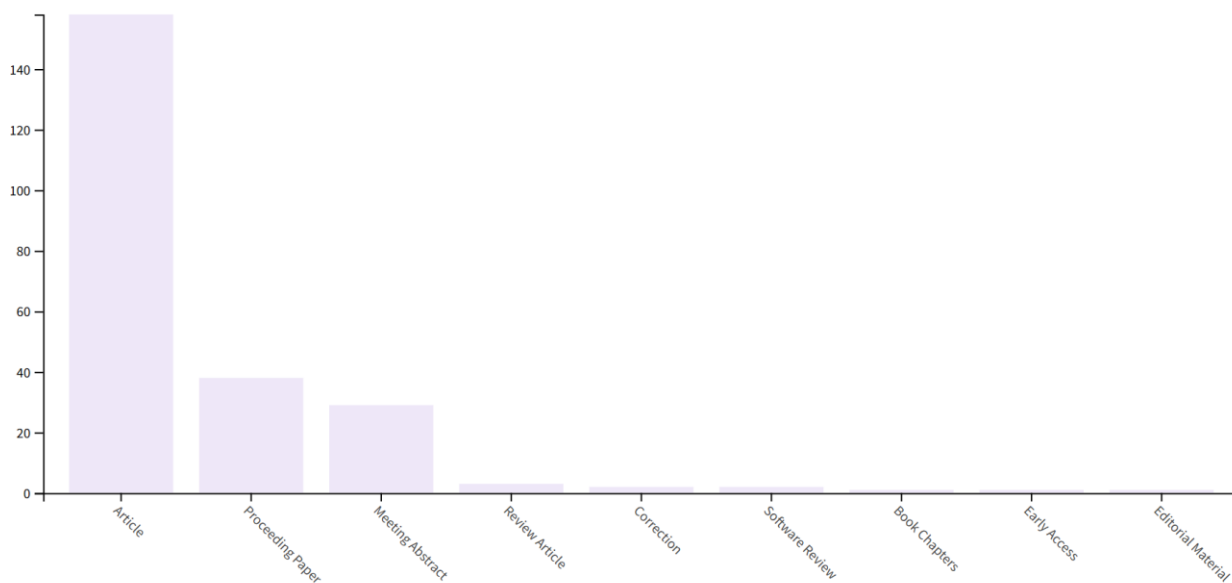
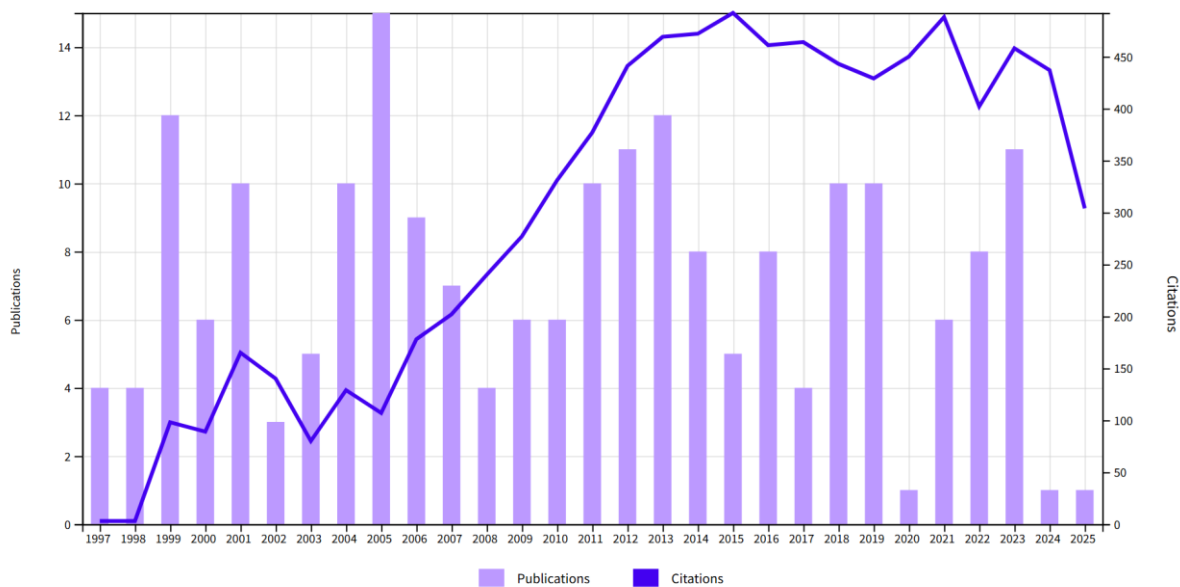
Elenco delle pubblicazioni

Il dott. Caliandro è co-autore di più di 200 pubblicazioni scientifiche su riviste internazionali.

Report bibliografico ISI Web of Science (WoS, ORCID 0000-0002-0368-4925):

H-index 35, numero di citazioni 7124, 205 articoli

20% primo autore, 10% ultimo autore, 20% corresponding author



Report bibliografico Scoups (ID: 7003989918)

H-index 34, numero di citazioni 8482, 183 articoli

Report bibliografico Google Scholar

(https://scholar.google.com/citations?user=xg_sWZUAAAAJ&hl=en&oi=ao)

H-index 40, numero di citazioni 10340

Elenco delle pubblicazioni, ordinate in ordine cronologico e **raggruppate per aree tematiche:**

Sviluppo di metodologie cristallografiche innovative, teoriche, computazionali e sperimentali, e loro applicazioni per lo studio della materia cristallina e non-cristallina attraverso raggi X, elettroni e neutroni.

- 1) Carrozzini, B., Fedele, F., Moliterni, A., De Caro, L., Cuocci, C., Giannini, C., Caliandro R., Altomare, A. The AI-based phase-seeding (AI-PhaSeed) method: early applications and statistical analysis Journal of Applied Crystallography 2025, 58 (6).
- 2) Carrozzini, B., De Caro, L., Giannini, C., Altomare, A., Caliandro, R. The phase-seeding method for solving non-centrosymmetric crystal structures: a challenge for artificial intelligence Acta Crystallographica A - Foundations of Crystallography 2025, 81 (3):188-201.
- 3) Guccione, P., Diacono, D., Toso, S., Caliandro R. Towards the extraction of the crystal cell parameters from pair distribution function profiles IUCrJ 2023, 10 (5): 610-23. *Nota: corresponding author.*
- 4) Lopresti, M., Mangolini, B., Milanesio, M., Caliandro, R., Palin, L. Multivariate versus traditional quantitative phase analysis of X-ray powder diffraction and fluorescence data of mixtures showing preferred orientation and microabsorption. Journal of Applied Crystallography. 2022 55; 837-850.
- 5) Zappi A, Maini L, Galimberti G, Caliandro R, Melucci D. Quantifying API polymorphs in formulations using X-ray powder diffraction and multivariate standard addition method combined with net analyte signal analysis. European Journal of Pharmaceutical Sciences. 2019 Mar 15;130:36–43.
- 6) Milanesio M, Caliandro R, Palin L, Conterposito E. The use of Principal Component Analysis for fast and efficient kinetic analysis of combined in situ X-ray diffraction and spectroscopic data. Acta Crystallographica A-Foundation and Advances. 2018 Aug;74:E157–E157. *Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.*
- 7) Guccione P, Patin L, Belviso BD, Milanesio M, Caliandro R. Principal component analysis for automatic extraction of solid-state kinetics from combined in situ experiments. Physical Chemistry Chemical Physics. 2018 Aug 7;20(29):19560–71. *Nota: corresponding author, articolo selezionato dalla rivista per gli 2018 PCCP HOT Articles.*
- 8) Guccione P, Palin L, Milanesio M, Belviso BD, Caliandro R. Improved multivariate analysis for fast and selective monitoring of structural dynamics by in situ X-ray powder diffraction. Physical Chemistry Chemical Physics. 2018 Jan 28;20(4):2175–87. *Nota: corresponding author, articolo assegnato alla back cover del numero della rivista.*
- 9) Caliandro R. Methods for extracting and combining information from different datasets of crystalline samples. Acta Crystallographica A-Foundation and Advances. 2015;71:S142–S142. *Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.*
- 10) Caliandro R, Guccione P, Nico G, Tutuncu G, Hanson JC. Tailored multivariate analysis for

- modulated enhanced diffraction. *Journal of Applied Crystallography*. 2015 Dec;48:1679–91. *Nota: [corresponding author](#)*.
- 11) Burla MC, Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, Cuocci C, Giacovazzo C, Mallamo M, Mazzone A, Polidori G. Crystal structure determination and refinement via SIR2014. *Journal of Applied Crystallography*. 2015 Feb;48:306–9. *Nota: [articolo con un elevato numero di citazioni \(823 WoS\)](#)*
 - 12) Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, Comunale G, Giacovazzo C, Mazzone A. Protein phasing at non-atomic resolution by combining Patterson and VLD techniques. *Acta Crystallographica Section D-Structural Biology*. 2014 Jul;70:1994–2006.
 - 13) Chernyshov, D., van Beek, W., Emerich, H., Milanesio, M., Palin, L., Caliendo, R., Urakawa, A. Getting More from Powder Diffraction Experiment: Modulation-Enhanced Diffraction *Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances* 2014 70(a1):C132-C132. *Nota: [trattasi di abstract pubblicato su rivista](#)*.
 - 14) Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, Comunale G, Giacovazzo C. On the use of the C map in Patterson deconvolution procedures. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2013 Jan;69:98–107.
 - 15) Caliendo R, Dibenedetto D, Cascarano GL, Mazzone A, Nico G. Automatic alpha-helix identification in Patterson maps. *Acta Crystallographica Section D-Biological Crystallography*. 2012 Jan;68:1–12. *Nota: [corresponding author. L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 14.1](#)*.
 - 16) Caliendo R, Chernyshov D, Emerich H, Milanesio M, Palin L, Urakawa A, van Beek W, Viterbo D. Patterson selectivity by modulation-enhanced diffraction. *Journal of Applied Crystallography*. 2012 Jun;45:458–70. *Nota: [corresponding author](#)*.
 - 17) Burla MC, Caliendo R, Camalli M, Carrozzini B, Cascarano GL, Giacovazzo C, Mallamo M, Mazzone A, Polidori G, Spagna R. SIR2011: a new package for crystal structure determination and refinement. *Journal of Applied Crystallography*. 2012 Apr;45:357–61. *Nota: [articolo con un elevatissimo numero di citazioni \(563 WoS\)](#)*
 - 18) Giacovazzo C, Burla MC, Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, Comunale G, Mazzone A, Polidori G, Siliqi D. New phasing methods for high throughput crystallography. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2011;67:C162–C162. *Nota: [trattasi di abstract pubblicato su rivista](#)*.
 - 19) Chernyshov D, van Beek W, Emerich H, Milanesio M, Urakawa A, Viterbo D, Palin L, Caliendo R. Kinematic diffraction on a structure with periodically varying scattering function. *Acta Crystallographica Section A*. 2011 Jul;67:327–35. *Nota: [articolo con un elevato numero di citazioni \(44 WoS\)](#)*
 - 20) Cascarano GL, Caliendo R, Dibenedetto D, Nico G, Mazzone A. Automatic identification of alpha-helices in Patterson maps. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2011;67:C598–9. *Nota: [trattasi di abstract pubblicato su rivista](#)*.
 - 21) Siliqi D, Caliendo R. New development in ILMILIONE package: two computational tools for H/D determination in protein structures from neutron data. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2010;66:S111–S111. *Nota: [trattasi di abstract pubblicato su rivista. L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 54.3](#)*.
 - 22) Siliqi D, Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, Mazzone A. New computational tools for H/D determination in macromolecular structures from neutron data. *Acta Crystallographica Section D-Structural Biology*. 2010 Nov;66:1164–71. *Nota: [l'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 6.3](#)*.
 - 23) Burla MC, Caliendo R, Giacovazzo C, Polidori G. The difference electron density: a probabilistic reformulation. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2010 May;66:347–61. *Nota: [L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 54.3. Articolo con un elevato numero di citazioni \(39 WoS\)](#)*

- 24) Siliqi D, Caliandro R, Carrozzini B, Cascarano GL, Giocovazzo C, Mazzone A. DEA: The Combination of the DEDM-EDM Procedure with Automatic Model Building Packages to Solve Difficult Protein Phasing Cases. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2009;65:S38–9. *Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista. L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 49.9.*
- 25) Giocovazzo C, Caliandro R, Carrozzini B, Cascarano GL, Mazzone A, Siliqi D. Molecular Replacement: A New Probabilistic Approach. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2009;65:S33–S33. *Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista. L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 49.9.*
- 26) Caliandro R, Carrozzini B, Cascarano GL, Giocovazzo C, Mazzone A, Siliqi D. Molecular replacement: the probabilistic approach of the program REMO09 and its applications. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2009 Nov;65:512–27. *Nota: L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 49.9.*
- 27) Caliandro R, Carrozzini B, Cascarano GL, Giocovazzo C, Mazzone AM, Siliqi D. EDM-DEDM and protein crystal structure solution. *Acta Crystallographica Section D-Structural Biology*. 2009 May;65:477–84.
- 28) Caliandro R, Carrozzini B, Cascarano GL, Giocovazzo C, Mazzone A, Siliqi D. Crystal structure solution of small-to-medium-sized molecules at non-atomic resolution. *Journal of Applied Crystallography*. 2009 Apr;42:302–7.
- 29) Caliandro R, Carrozzini B, Cascarano GL, Giocovazzo C, Mazzone AM, Siliqi D. Advances in the EDM-DEDM procedure. *Acta Crystallographica Section D-Structural Biology*. 2009 Mar;65:249–56.
- 30) Caliandro R, Giocovazzo C, Rizzi R. Crystal Structure Determination. In *Powder Diffraction. Theory and Practice*. Edited by R. E. Dinnebier and S. J. L. Billinge. Cambridge: RSC Publishing, 2008, ISBN ISBN (print): 978-0-85404-231-9. *Nota: trattasi di un capitolo di libro.*
- 31) Caliandro R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giocovazzo C, Siliqi D. The (Fo-Fc) Fourier synthesis: a probabilistic study. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2008 Sep;64:519–28.
- 32) Caliandro R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giocovazzo C, Mazzone A, Siliqi D. Ab initio phasing of proteins with heavy atoms at non-atomic resolution: pushing the size limit of solvable structures up to 7890 non-H atoms in the asymmetric unit. *Journal of Applied Crystallography*. 2008 Jun;41:548–53. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (31 WoS). Questo articolo è stato messo in evidenza nel volume "Highlights CNR 2008-2009", con un articolo dal titolo "Un nuovo limite di risoluzione è stato stabilito dalla cristallografia" (pag.66), redatto da Caliandro R.*
- 33) Altomare A, Caliandro R, Cuocci C, Giocovazzo C, Moliterni AGG, Rizzi R, Platteau C. Direct methods and simulated annealing: a hybrid approach for powder diffraction data. *Journal of Applied Crystallography*. 2008 Feb;41:56–61. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (32 WoS)*
- 34) Caliandro R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giocovazzo C, Siliqi D. Advances in the free lunch method. *Journal of Applied Crystallography*. 2007 Oct;40:931–7.
- 35) Caliandro R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giocovazzo C, Siliqi D. Advances in ab initio protein phasing by Patterson deconvolution techniques. *Journal of Applied Crystallography*. 2007 Oct;40:883–90.
- 36) Burla MC, Caliandro R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giocovazzo C, Polidori G, Siliqi D. The revenge of the Patterson methods. II. Substructure applications. *Journal of Applied Crystallography*. 2007 Apr;40:211–7.
- 37) Burla MC, Caliandro R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giocovazzo C, Polidori G, Siliqi D. The revenge of the Patterson methods. III. Ab initio phasing from powder diffraction data. *Journal of Applied Crystallography*. 2007 Oct;40:834–40.
- 38) Burla MC, Caliandro R, Camalli M, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giocovazzo C,

- Polidori G, Siliqi D, Spagna R. IL MILIONE: a suite of computer programs for crystal structure solution of proteins. *Journal of Applied Crystallography*. 2007 Jun;40:609–13. [Nota: articolo con un elevatissimo numero di citazioni \(722 WoS\)](#)
- 39) Altomare A, Caliendo R, Camalli M, Cuocci C, da Silva I, Giacovazzo C, Moliterni AGG, Rizzi R. EXPO2006: A tool for powder Crystallography. *Solid State Phenomena* 130: 21–6. [Nota: trattasi di contributo in volume.](#)
 - 40) Cascarano GL, Burla MC, Caliendo R, Camalli M, Carrozzini B, De Caro L, Giacovazzo C, Polidori G, Siliqi D, Spagna R. IL MILIONE: a new suite for crystal structure solution. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2006;62:S241–S241. [Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.](#)
 - 41) Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giacovazzo C, Siliqi D. The Patterson deconvolution method for the ab-initio structure solution of large proteins. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2006;62:S86–S86. [Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.](#)
 - 42) Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giacovazzo C, Mazzone AM, Siliqi D. Molecular replacement: the approach of the program REMO. *Journal of Applied Crystallography*. 2006 Apr;39:185–93.
 - 43) Burla MC, Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giacovazzo C, Polidori G, Siliqi D. Use of Patterson-based methods automatically to determine the structures of heavy-atom-containing proteins with up to 6000 non-hydrogen atoms in the asymmetric unit. *Journal of Applied Crystallography*. 2006 Oct;39:728–34. [Nota: corresponding author.](#)
 - 44) Burla MC, Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giacovazzo C, Polidori G, Siliqi D. Patterson Deconvolution and SAD Phasing in IL MILIONE. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2006;62:S240–S240. [Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.](#)
 - 45) Burla MC, Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giacovazzo C, Siliqi D. The revenge of the Patterson methods. I. Protein ab initio phasing. *Journal of Applied Crystallography*. 2006 Aug;39:527–35.
 - 46) Siliqi D, Altomare A, Burla MC, Caliendo R, De Caro L, Carrozzini B, Cascarano GL, Cuocci C, Giacovazzo C, Moliterni AGG. IL MILIONE: A Complete Package for a Global Phasing, from Powders to Proteins. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2005;61:C153–C153. [Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.](#)
 - 47) Moliterni AG, Altomare A, Caliendo R, Camalli M, Cuocci C, Giacovazzo C, Rizzi R. New Strategies for the ab-initio Structure Solution in EXPO2005. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2005;61:C45–C45. [Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.](#)
 - 48) Giacovazzo C, Altomare A, Caliendo R, Cuocci C, Moliterni AG, Rizzi R. Phasing via full Pattern Powder Decomposition by Monte Carlo and Patterson Methods. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2005;61:C31–C31. [Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.](#)
 - 49) Cuocci C, Moliterni AG, Altomare A, da Silva I, Caliendo R, Camalli M, Giacovazzo C, Rizzi R. Space Group Determination by EXPO2005. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2005;61:C158–C158. [Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.](#)
 - 50) Carrozzini B, Burla MC, Caliendo R, Camalli M, Cascarano GL, De Caro L, Giacovazzo C, Polidori G, Spagna R. SIR2004: New Features for ab-initio Crystal Structure Solution. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2005;61:C151–C151. [Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.](#)
 - 51) Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giacovazzo C, Siliqi D. Phasing at Resolution higher than the Experimental one. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2005;61:C83–C83. [Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.](#)
 - 52) Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giacovazzo C, Siliqi D. Phasing at resolution higher than the experimental resolution. *Acta Crystallographica Section D-Structural Biology*. 2005 May;61:556–65. [Nota: articolo con un elevato numero di citazioni \(61 WoS\)](#)

- 53) Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giocovazzo C, Siliqi D. Ab initio phasing at resolution higher than experimental resolution. Acta Crystallographica Section D-Structural Biology. 2005 Aug;61:1080–7. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (42 WoS)*
- 54) Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giocovazzo C, Moustiakimov M, Siliqi D. The partial structure with errors: a probabilistic treatment. Acta Crystallographica A-Foundation and Advances. 2005 May;61:343–9.
- 55) Burla MC, Caliendo R, Camalli M, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giocovazzo C, Polidori G, Spagna R. SIR2004: an improved tool for crystal structure determination and refinement. Journal of Applied Crystallography. 2005 Apr;38:381–8. *Nota: articolo con elevatissimo numero di citazioni (2624 WoS). L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 5.2.*
- 56) Burla MC, Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giocovazzo C, Polidori G. About the efficiency of the early FOMs in ab initio protein phasing. Journal of Applied Crystallography. 2004 Oct;37:791–801.
- 57) Burla MC, Caliendo R, Carrozzini B, Cascarano GL, De Caro L, Giocovazzo C, Polidori G. Ab initio protein phasing: the Patterson deconvolution method in SIR2002. Journal of Applied Crystallography. 2004 Apr;37:258–64.
- 58) Altomare A, Caliendo R, Da Silva I, Giocovazzo C, Moliterni AGG, Rizzi R, Cuocci C. The use of geometrical information in the ab-initio powder structure solution by direct methods. Applied Crystallography 57-64, Morawiec H, Stroz D, editors. 2004. *Nota: trattasi di contributo in volume.*
- 59) Altomare A, Caliendo R, Cuocci C, da Silva I, Giocovazzo C, Moliterni AGG, Rizzi R. The use of error-correcting codes for the decomposition of a powder diffraction pattern. Journal of Applied Crystallography. 2004 Apr;37:204–9.
- 60) Altomare A, Caliendo R, Camalli M, Cuocci C, Giocovazzo C, Moliterni AGG, Rizzi R. Automatic structure determination from powder data with EXPO2004. Journal of Applied Crystallography. 2004 Dec;37:1025–8. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (186 WoS)*
- 61) Altomare A, Caliendo R, Camalli M, Cuocci C, Giocovazzo C, Moliterni AGG, Rizzi R, Spagna R, González-Platas J. Towards EXPO2005. Zeitschrift Fur Kristallographie. 2004;219(12):833–7.
- 62) Altomare A, Caliendo R, Camalli M, Cuocci C, da Silva I, Giocovazzo C, Moliterni AGG, Spagna R. Space-group determination from powder diffraction data: a probabilistic approach. Journal of Applied Crystallography. 2004 Dec;37:957–66. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (44 WoS)*
- 63) Burla MC, Carrozzini B, Caliendo R, Cascarano GL, De Caro L, Giocovazzo C, Polidori G. Ab initio protein phasing at 1.4 angstrom resolution: the new phasing approach of SIR2003-N. Acta Crystallographica A-Foundation and Advances. 2003 Nov;59:560–8.
- 64) Altomare A, Caliendo R, Giocovazzo C, Moliterni AGG, Rizzi R. Solution of organic crystal structures from powder diffraction by combining simulated annealing and direct methods. Journal of Applied Crystallography. 2003 Apr;36:230–8.
- 65) Altomare A, Caliendo R, Cuocci C, Giocovazzo C, Moliterni AGG, Rizzi R. A systematic procedure for the decomposition of a powder diffraction pattern. Journal of Applied Crystallography. 2003 Jun;36(3):906–13.
- 66) Moliterni A.G.G., Altomare A., Caliendo R., Cuocci C., Giocovazzo C., Guagliardi A., Rizzi R. EXPO2002: THE NEW HEIR OF EXPO Acta Crystallographica A – Foundation and Advances 2002 58, C266. *Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.*
- 67) Giocovazzo C, Siliqi D, Cascarano G, Caliendo R, Melidoro A. On integrating direct methods and isomorphous replacement techniques. The formula P-10. Acta Crystallographica Section A. 1997 May 1;53:253–63.
- 68) Caliendo R, Cascarano G, Giocovazzo C, Melidoro A. Direct methods versus electron diffraction: The first experiences by SIR97. In: Dorset DL, Hovmoller S, Zou XD, editors. Electron Crystallography. 1997. p. 261–72. *Nota: trattasi di contributo in volume.*

Sviluppo di strumentazione, metodiche e set-up dedicati per applicazioni sperimentali dello scattering di raggi X da sorgenti convenzionali, della luce di sincrotrone e di neutroni.

- 1) Mazzone, A., Lopresti, M., Belviso, B.D., Caliandro, R. New features of the RootProf program for model-free analysis of unidimensional profiles journal of Applied Crystallography 2023, 56 (6): 1841-1854. *Nota: corresponding author.*
- 2) Palin L, Caliandro R, Viterbo D, Milanesio M. Chemical selectivity in structure determination by the time dependent analysis of in situ XRPD data: a clear view of Xe thermal behavior inside a MFI zeolite. Physical Chemistry Chemical Physics. 2015;17(26):17480–93. *Nota: l'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 4.4.*
- 3) Caliandro R, Belviso DB. RootProf: software for multivariate analysis of unidimensional profiles. Journal of Applied Crystallography. 2014 Jun;47:1087–96. *Nota: corresponding author. Articolo con un elevato numero di citazioni (52 WoS).*
- 4) Milanesio M., Palin L., Viterbo D., Caliandro R., Urakawa A., van Beek W., Chernyshov D. Chemical Selectivity in Diffraction by Statistical Analysis of in situ XRPD Data Acta Crystallographica A - Foundation and Advances 2014, 70:C1471. *Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.*
- 5) van Beek W, Emerich H, Urakawa A, Palin L, Milanesio M, Caliandro R, Viterbo D, Chernyshov D. Untangling diffraction intensity: modulation enhanced diffraction on ZrO₂ powder. Journal of Applied Crystallography. 2012 Aug;45:738–47.
- 6) Chernyshov D, van Beek W, Emerich H, Urakawa A, Palin L, Milanesio M, Caliandro R, Viterbo D. Modulation Enhanced Diffraction - from Theory to Experiment. Acta Crystallographica A- Foundation and Advances. 2012;68:S125–S125. *Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.*
- 7) van Beek W, Chernyshov D, Emerich H, Urakawa A, Palin L, Viterbo D, Caliandro R., Milanesio M. Modulation Enhanced Diffraction: a new tool for solving crystal structures and study solid-state kinetics. Acta Crystallographica A-Foundation and Advances. 2011;67:C165–6. *Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.*
- 8) Milanesio M, van Beek W, Palin L, Caliandro R, Viterbo D, Urakawa A, Chernyshov D, Emerich H. Chemical selectivity in structure determination by modulation enhanced X-ray diffraction. Acta Crystallographica A-Foundation and Advances. 2011;67:C206–C206. *Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.*
- 9) Caliandro R, van Beek W, Milanesio M, Urakawa A, Chernyshov D, Viterbo D, Palin L, Emerich H. Modulation excitation spectroscopy adapted to Crystallography. Acta Crystallographica A- Foundation and Advances. 2011;67:C582–3. *Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.*
- 10) Riedler P, Anelli G, Antinori F, Burns M, Banicz K, Caliandro R, et al. First results from the ALICE silicon pixel detector prototype. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section a-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment. 2003 Mar 21;501(1):111–8.
- 11) Caliandro R, Dinapoli R, Fini RA, Virgili T. Simulation of the response of a silicon pixel detector. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section a-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment. 2002 Apr 21;482(3):619–28.
- 12) van Hunen JJ, Anelli G, Burns M, Banicz K, Campbell M, Chochula P, et al. Irradiation and SPS beam tests of the Alice1LHCb pixel chip. In: Isabella C, editor. Proceedings of the Seventh Workshop on Electronics for Lhc Experiments. 2001. p. 85–9. *Nota: trattasi di contributo in volume.*
- 13) Caliandro R, Dinapoli R, Fini RA, Ghidini B, Manzari V, Virgili T. Simulation of the response of the NA57 silicon pixel detector. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section a-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment. 2001 Jun 1;465(1):135–9. *Nota: corresponding author.*
- 14) Caliandro R, De Cataldo G, Favuzzi C, Fusco P, Ghidini B, Giglietto N, Mazziotta MN, Spinelli P. A fast transition radiation detector for first-level triggering. Nuclear Instruments & Methods in

Physics Research Section a-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment. 2001 Apr 1;461(1-3):556–9.

- 15) Caliendo R, De Cataldo G, Favuzzi C, Fusco P, Giglietto N, Ghidini B, Mazziotta MN, Spinelli P. A fast transition radiation detector for high-energy particles selection and triggering. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section a-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment. 2000 Dec 1;455(2):305–18.

Studi strutturali e microstrutturali di nanomateriali e biomateriali di interesse scientifico e tecnologico.

- 1) Provinciali, G., Consoli, N.A., Degli Innocenti, M., Moliterni, A., Tresmann, H., Caliendo, R., Giannini, C., Pedicini, R., Giambastiani, G., Tuci, G., Lelli, M., Rossin, A., A Lightweight Beryllium Metal–Organic Framework for Combined Physical and Chemical Hydrogen Storage ACS Applied Energy Materials 2025 <https://doi.org/10.1021/acsaem.5c02864>. *Nota: articolo non ancora presente su WoS. L'impact factor della rivista è 6.4.*
- 2) Provinciali, G., Consoli, N.A., Caliendo, R., Mangini, V., Barba, L., Giannini, C., Tuci, G., Giambastiani, G., Lelli, M., Rossin, A. Ammonia Borane and Hydrazine Bis (borane) Confined within Zirconium Bithiazole and Bipyridyl Metal–Organic Frameworks as Chemical Hydrogen Storage Materials The Journal of Physical Chemistry C 2025, 129 (13): 6094-6108. *Nota: articolo non ancora presente su WoS.*
- 3) Caliendo, R., Berretti, E., Pagliaro, M.V., Ciriminna, R., Mangini, V., Giannini, C., Lavacchi, A., Pagliaro, M. Structural dynamics of a nickel electrocatalyst during water splitting observed via the operando pair distribution function Cell Reports Physical Science 2024, 5 (12) 102341. *Nota: articolo non ancora presente su WoS. L'impact factor della rivista è 6.9.*
- 4) Kojčinović, J., Tatar, D., Šarić, S., Pravda, C.B., Mavrič, A., Arčon, I., Jagličić, Z., Mellin, M., Einert, M., Altomare, A., Caliendo, R., Kukovec, Á., Hofmann, J.P., Djerdj, I. Resolving a structural issue in cerium-nickel-based oxide: a single compound or a two-phase system? Dalton transactions 2024, 53 (5): 2082-97.
- 5) Pagliaro, M., Pagliaro, M.V., Caliendo, R., Giannini, C., Ciriminna, R., Lavacchi A. NiGraf: a new nickel-based molecularly doped metal for enhanced water electrolysis Materials Advances 2024, 5 (7): 2759-66. *Nota: l'impact factor della rivista è 4.7 l'Articolo è stato inserito nella "2024 Popular Advances collection" della rivista.*
- 6) Quarta, D., Toso, S., Saleh, G., Caliendo, R., Moliterni, A., Griesi, A., Divitini, G., Infante, I., Gigli, G., Giannini, C., Manna, L., Giansante, C. Mixed valence of bismuth in hexagonal chalcogenide nanocrystals Chemistry of Materials 2023, 35 (3): 1029-36. *Nota: corresponding author. L'impact factor della rivista è 8.6.*
- 7) Quarta, D., Toso, S., Fieramosca, A., Dominici, L., Caliendo, R., Moliterni, A., Tobaldi, D.M., Saleh, G., Gushchina, I., Brescia, R., Prato, M., Infante, I., Cola, A., Giannini, C., Manna, L., Gigli, G. Giansante, C. Direct Band Gap Chalcogenide Semiconductors: Quaternary AgBiS₂ Nanocrystals Chemistry of Materials 2023, 35 (23), 9900-9906. *Nota: l'impact factor della rivista è 8.6.*
- 8) Toso, S., Imran, M., Mugnaioli, E., Moliterni, A., Caliendo, R., Schrenker, N.J., Pianetti, A., Zito, J., Zaccaria, F., Wu, Y., Gemmi, M., Giannini, C., Brovelli, S., Infante, I., Bals, S., Manna, L. Halide perovskites as disposable epitaxial templates for the phase-selective synthesis of lead sulfochloride nanocrystals Nature Communications, 2022, 13 (1), art. no. 3976. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (34 WoS). L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 16.6.*
- 9) Quarta, D., Toso, S., Giannuzzi, R., Caliendo, R., Moliterni, A., Saleh, G., Capodilupo, A.-L., Debellis, D., Prato, M., Nobile, C., Maiorano, V., Infante, I., Gigli, G., Giannini, C., Manna, L., Giansante, C. Colloidal Bismuth Chalcogenide Nanocrystals Angewandte Chemie - International Edition, 2022, 61 (22), art. no. e202201747. *Nota: corresponding author. Articolo con un elevato numero di citazioni (38 WoS). L'articolo appare nella lista degli articoli raccomandati nella Wiley*

online library come "Hot paper".

- 10) Zhang, B., Altamura, D., Caliandro, R., Giannini, C., Peng, L., De Trizio, L., Manna, L. Stable CsPbBr₃ Nanoclusters Feature a Disk-like Shape and a Distorted Orthorhombic Structure Journal of the American Chemical Society, 2022, 144 (11): 5059-66. *Nota: l'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 15.0.*
- 11) Guccione, P., Lopresti, M., Milanesio, M., Caliandro, R. Multivariate analysis applications in x-ray diffraction Crystals, 2021 11 (1), art. no. 12:1-21. *Nota: corresponding author e ultimo autore.*
- 12) Belviso, B.D., Marin, F., Fuertes, S., Sicilia, V., Rizzi, R., Ciriaco, F., Cappuccino, C., Dooryhee, E., Falcicchio, A., Maini, L., Altomare, A., Caliandro, R. Structural Insights into the Vapochromic Behavior of Pt- And Pd-Based Compounds Inorganic Chemistry, 2021 60 (9):6349-66. *Nota: corresponding author.*
- 13) Conterosito E, Palin L, Caliandro R, van Beek W, Chernyshov D, Milanesio M. CO₂ adsorption in Y zeolite: a structural and dynamic view by a novel principal-component-analysis-assisted in situ single-crystal X-ray diffraction experiment. Acta Crystallographica A-Foundation and Advances. 2019 Mar;75:214–22.
- 14) Caliandro R, Toson V, Palin L, Conterosito E, Aceto M, Gianotti V, Bocaleri E, Dooryhee E, Milanesio M. New Hints on the Maya Blue Formation Process by PCA-Assisted In Situ XRPD/PDF and Optical Spectroscopy. Chemistry-a European Journal. 2019 Sep 2;25(49):11503–11. *Nota: l'impact factor della rivista è 4.8.*
- 15) Caliandro R, Altamura D, Belviso BD, Rizzo A, Masi S, Giannini C. Investigating temperature-induced structural changes of lead halide perovskites by in situ X-ray powder diffraction. Journal of Applied Crystallography. 2019 Oct 1;52:1104–18. *Nota: corresponding author.*
- 16) Masi S, Aiello F, Listorti A, Balzano F, Altamura D, Giannini C, Caliandro R, Uccello-Barretta G, Rizzo A, Colella S. Connecting the solution chemistry of PbI₂ and MAI: a cyclodextrin-based supramolecular approach to the formation of hybrid halide perovskites. Chemical Science. 2018 Mar 28;9(12):3200–8. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (59 WoS). L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 9.6.*
- 17) Colella S, Todaro M, Masi S, Listorti A, Altamura D, Caliandro R, et al. Light-Induced Formation of Pb³⁺ Paramagnetic Species in Lead Halide Perovskites. ACS Energy Letters. 2018 Aug;3(8):1840–7. *Nota: corresponding author. Articolo con un elevato numero di citazioni (33 WoS) L'impact factor della rivista è 19.0.*
- 18) Caliandro R, Belviso BD, Cuocci C, Fuertes S, Sicilia V, Hanson JC, Tutuncu G, Doorhyee E, Altomare A. Dynamic characterization of structural changes in vapochromic compounds by pair distribution function. Powder Diffraction. 2017 Sep;32:S118–22. *Nota: corresponding author.*
- 19) Caliandro R, Sibillano T, Belviso BD, Scarfiello R, Hanson JC, Dooryhee E, Manca M, Cozzoli PD, Giannini C. Static and Dynamical Structural Investigations of Metal-Oxide Nanocrystals by Powder X-ray Diffraction: Colloidal Tungsten Oxide as a Case Study. Chemphyschem. 2016 Mar 3;17(5):699–709. *Nota: corresponding author.*
- 20) Rizzuti A, Dassisti M, Mastroilli P, Sportelli MC, Cioffi N, Picca RA, Agostinelli E, Varvaro G, Caliandro R. Shape-control by microwave-assisted hydrothermal method for the synthesis of magnetite nanoparticles using organic additives. Journal of Nanoparticle Research. 2015 Oct 16;17(10):408. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (35 WoS).*

Sintesi e studio delle relazioni struttura-attività-funzione di composti inorganici, organici, bioinorganici e farmaceutici.

- 1) Cafferati Beltrame, L., Todisco, S., Francavilla, A.L., Mangini, V., Bombino, E., Sciancalepore, A.G., Scaglione, V., Sgobba, M.N., Trisolini, L., Laera, L., Colella, F., Spadone, S., Belviso, B.D., Guerra, L., De Grassi, A., Caliandro, R., De Stradis, A., Volpicella, M., Pierri, C.L. Discovery of therapeutic AGC2 modulators by combining docking, binding, and vesicle-based transport assays

- Journal of Translational Medicine 2025, 23 (1), art. n.1033. *Nota: articolo non ancora presente su WoS. L'impact factor della rivista è 8.4.*
- 2) Milani, G., Budriesi, R., Tavazzani, E., Cavalluzzi, M.M., Mattioli, L.B., Miniero, D.V., Delre, P., Belviso, B.D., Denegri, M., Cuocci, C., Rotondo, N.P., De Palma, A., Gualdani, R., Caliendo, R., Mangiatordi, G.F., Kumawat, A., Camilloni, C., Priori, S., Lentini G. hERG stereoselective modulation by mexiletine-derived ureas: Molecular docking study, synthesis, and biological evaluation *Archiv der Pharmazie* 2023, 356 (10), 2300116. *Nota: l'impact factor della rivista è 5.1.*
 - 3) Caliendo, R., Milanesio, M. Multivariate analysis applications to crystallography *Crystals*, 2021 11 (2), art. No. 166:1-2. . *Nota: Primo autore. Contributo Editoriale.*
 - 4) Carrozzini B, Belviso BD, Bruno C, Cavalluzzi MM, Lovece A, Lentini G, Caliendo R. The Crystal Structure of N-[(2E)-3-(4-Chlorophenyl)prop-2-en-1-yl]-4-methoxy-N-methylbenzenesulfo namide. *Journal of Chemical Crystallography*. 2019 Jun;49(2):87–91. *Nota: corresponding author.*
 - 5) Loi M, Fanelli F, Cimmarusti MT, Mirabelli V, Haidukowski M, Logrieco AF, Caliendo R, Mulè G. In vitro single and combined mycotoxins degradation by Ery4 laccase from *Pleurotus eryngii* and redox mediators. *Food Control*. 2018 Aug;90:401–6. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (81 WoS). L'impact factor della rivista è 4.2.*
 - 6) Italiano F, Agostiano A, Belviso BD, Caliendo R, Carrozzini B, Comparelli R, Melillo MT, Mesto E, Tempesta G, Trotta M. Interaction between the photosynthetic anoxygenic microorganism *Rhodobacter sphaeroides* and soluble gold compounds. From toxicity to gold nanoparticle synthesis. *Colloids and Surfaces B-Biointerfaces*. 2018 Dec 1;172:362–71. *Nota: l'impact factor della rivista è 4.4.*
 - 7) Tiscia GL, Favuzzi G, Lupone MR, Cappucci F, Schiavulli M, Mirabelli V, D'Andrea G, Chinni E, Giuliani N, Caliendo R, Grandone E. Factor XI gene variants in factor XI-deficient patients of Southern Italy: identification of a novel mutation and genotype-phenotype relationship. *Human Genome Variation*. 2017;4:UNSP 17043.
 - 8) Liuzzi VC, Mirabelli V, Cimmarusti MT, Haidukowski M, Leslie JF, Logrieco AF, Caliendo R, Fanelli F, Mulè G. Enniatin and Beauvericin Biosynthesis in *Fusarium* Species: Production Profiles and Structural Determinant Prediction. *Toxins*. 2017 Feb;9(2):45. *Nota: corresponding author. Articolo con un elevato numero di citazioni (66 WoS).*
 - 9) Palin L, Conterposito E, Caliendo R, Boccaleri E, Croce G, Kumar S, van Beek W, Milanesio M. Rational design of the solid-state synthesis of materials based on poly-aromatic molecular complexes. *Crystengcomm*. 2016;18(31):5930–9.
 - 10) Dell'Anna MM, Censi V, Carrozzini B, Caliendo R, Denora N, Franco M, Veclani D, Melchior A, Tolazzi M, Mastroianni P. Triphenylphosphane Pt(II) complexes containing biologically active natural polyphenols: Synthesis, crystal structure, molecular modeling and cytotoxic studies. *Journal of Inorganic Biochemistry*. 2016 Oct;163:346–61.
 - 11) Milanesio M, Palin L, Viterbo D, van Beek W, Chernyshov D, Urakawa A, Caliendo R. Investigating Repeated Gas adsorption in zeolites for solar cooling applications. *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*. 2012;68:S42–S42. *Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.*
 - 12) Cardinali A, Tursi N, Ligorio A, Giuffrida MG, Napolitano L, Caliendo R, Sergio L, Di Venere D, Lattanzio V, Sonnante G. Purification, biochemical characterization and cloning of a new cationic peroxidase isoenzyme from artichoke. *Plant Physiology and Biochemistry*. 2011 Apr;49(4):395–403.

Progettazione su basi molecolari, sintesi, produzione, cristallizzazione e caratterizzazione strutturale e funzionale di biomolecole, in fase solida o liquida, anche in interazione con ligandi e/o metalli, per applicazioni biotecnologiche e/o farmaceutiche.

- 1) Carmona-Carmona, C.A., Bisello, G., Franchini, R., Lunardi, G., Galavotti, R., Perduca, M., Ribeiro, R.P., Belviso, B.D., Giorgetti, A., Caliendo, R., Lievens, P. M.-J., Bertoldi M. The CRISPR-Cas9

- knockout DDC SH-SY5Y in vitro model for AADC deficiency provides insight into the pathogenicity of R347Q and L353P variants: a cross-sectional structural and functional analysis *The FEBS Journal* 2025, 292, (18): 4833-53. *Nota: l'impact factor della rivista è 5.6.*
- 2) Belviso, B.D., Shen, Y., Carrozzini, B., Morishita, M., di Luccio, E., Caliandro R. Structural insights into the C-terminus of the histone-lysine N-methyltransferase NSD3 by small-angle X-ray scattering *Frontiers in Molecular Biosciences* 2024, 11, 1191246. *Nota: ultimo autore e corrisponding author.*
 - 3) Bisello, G., Ribeiro, R.P., Perduca, M., Belviso, B.D., de'Laureto, P.P., Giorgetti, A., Caliandro, R., Bertoldi M. Human aromatic amino acid decarboxylase is an asymmetric and flexible enzyme: Implication in aromatic amino acid decarboxylase deficiency *Protein Science* 2023, 32 (8), e4732. *Nota: l'impact factor della rivista è 5.2.*
 - 4) Mangini, V., Grasso, G., Belviso, B.D., Sciacca, M.F.M., Lanza, V., Caliandro, R., Milardi, D. Stretching the chains: the destabilizing impact of Cu²⁺ and Zn²⁺ ions on K48-linked diubiquitin *Dalton Transactions* 2023, 52 (34), 11835-11849. *Nota: corrisponding author.*
 - 5) Mangini, V., Belviso, B.D., Nardella, M.I., Natile, G., Arnesano, F., Caliandro, R. Crystal Structure of the Human Copper Chaperone ATOX1 Bound to Zinc Ion Biomolecules, 2022, 12 (10), art. no. 1494.
 - 6) Belviso, B.D., Mangiatordi, G.F., Alberga, D., Mangini, V., Carrozzini, B., Caliandro, R. Structural Characterization of the Full-Length Anti-CD20 Antibody Rituximab *Frontiers in Molecular Biosciences*, 2022 9, art. no. 823174. *Nota: corrisponding author. L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 6.1.*
 - 7) Varsalona, M., Belviso, B.D., Labarile, R., Italiano, F., Farinola, G.M., Trotta, M., Caliandro, R. The role of cytochrome c in the chromate reduction by *Rhodobacter sphaeroides* (2022) 2022 IEEE International Workshop on Metrology for the Sea, Learning to Measure Sea Health Parameters, MetroSea 2022 - Proceedings, pp. 96-100.
 - 8) Bolognino, I., Carrieri, A., Purgatorio, R., Catto, M., Caliandro, R., Carrozzini, B., Belviso, B.D., Majellaro, M., Sotelo, E., Cellamare, S., Altomare, C.D. Enantiomeric Separation and Molecular Modelling of Bioactive 4-Aryl-3,4-dihydropyrimidin-2(1H)-one Ester Derivatives on Teicoplanin-Based Chiral Stationary Phase Separations, 2022, 9 (1), art. no. 7.
 - 9) Miciaccia, M., Belviso, B.D., Iaselli, M., Cingolani, G., Ferorelli, S., Cappellari, M., Loguercio Polosa, P., Perrone, M.G., Caliandro, R., Scilimati, A. Three-dimensional structure of human cyclooxygenase (hCOX)-1 *Scientific Reports*, 2021, 11 (1), art. no. 4312. *Nota: corrisponding author. Articolo con un elevato numero di citazioni (51 WoS). Articolo menzionato nella news del CNR del 28/02/2020 intitolata "Ottenuta la struttura cristallografica della proteina COX-1 umana: un importante passo in avanti nella terapia antinfiammatoria".*
 - 10) Belviso, B.D., Perna, F.M., Carrozzini, B., Trotta, M., Capriati, V., Caliandro, R. Introducing Protein Crystallization in Hydrated Deep Eutectic Solvents *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*. 2021 9, 25: 8435–49. *Nota: corrisponding author. L'impact factor della rivista è 7.1. Articolo con un elevato numero di citazioni (37 WoS).*
 - 11) Catto M, Pisani L, de la Mora E, Belviso BD, Mangiatordi GF, Pinto A, De Palma A, Denora N, Caliandro R, Colletier J-P, Silman I, Nicolotti O, Altomare CD. Chiral Separation, X-ray Structure, and Biological Evaluation of a Potent and Reversible Dual Binding Site AChE Inhibitor. *ACS Medicinal Chemistry Letters*. 2020 May 14;11(5):869–76. *Nota: l'impact factor della rivista è 4.0.*
 - 12) Shen Y, Mevius DEHF, Caliandro R, Carrozzini B, Roh Y, Kim J, Kim S, Ha SC, Morishita M, di Luccio E. Set7 Is a H3K37 Methyltransferase in *Schizosaccharomyces pombe* and Is Required for Proper Gametogenesis. *Structure*. 2019 Apr 2;27(4):631– 638. *Nota: articolo menzionato nella news del CNR del 28/02/2019 intitolata "Scoperta una nuova proteina coinvolta nei meccanismi epigenetici alla base dell'infertilità maschile". L'impact factor della rivista è 4.9.*
 - 13) Nardella MI, Rosato A, Belviso BD, Caliandro R, Natile G, Arnesano F. Oxidation of Human Copper Chaperone Atox1 and Disulfide Bond Cleavage by Cisplatin and Glutathione. *International Journal of Molecular Sciences*. 2019 Sep 2;20(18):4390. *L'impact factor della rivista è 4.9.*

- 14) Lasorsa A, Nardella MI, Rosato A, Mirabelli V, Caliandro R, Caliandro Rosanna, Natile G., Arnesano F. Mechanistic and Structural Basis for Inhibition of Copper Trafficking by Platinum Anticancer Drugs. *Journal of the American Chemical Society*. 2019 Jul 31;141(30):12109–20. *Nota: articolo premiato dalla copertina del numero di rivista e menzionato nel comunicato stampa del CNR n. 8914 del 11/09/2019 intitolato "Scoperto il meccanismo di inibizione del trasporto del rame da parte di farmaci antitumorali a base di platino". La scoperta è riportata anche nell'articolo "Novità per i farmaci antitumorali a base di platino" presente nella rivista "Nuove Direzioni" 57 (2020), a pag 73, e dal comunicato stampa del 24 ottobre 2019 di Prens Latina, una agenzia informativa latinoamericana. dal titolo "Realizan en Italia aporte a lucha contra el cáncer". L'impact factor della rivista è 15.6. Articolo con un elevato numero di citazioni (36 WoS).*
- 15) Carrieri A, Lacivita E, Belviso BD, Caliandro R, Mastrorilli P, Gallo V, Niso M, Leopoldo M. Structural Determinants in the Binding of BB2 Receptor Ligands: In Silico, X-Ray and NMR Studies in PD176252 Analogues. *Current Topics in Medicinal Chemistry*. 2017;17(14):1599–610.
- 16) Belviso BD, Tangorra RR, Milano F, Omar OH, la Gatta S, Ragni R, Agostiano A, Farinola GM, Caliandro R, Trotta M. Crystallographic analysis of the photosynthetic reaction center from *Rhodobacter sphaeroides* bioconjugated with an artificial antenna. *Mrs Advances*. 2016;1(57):3789–800.
- 17) Belviso BD, Galliani A, Lasorsa A, Mirabelli V, Caliandro R, Arnesano F, Natile G. Oxaliplatin Binding to Human Copper Chaperone Atox1 and Protein Dimerization. *Inorganic Chemistry*. 2016 Jul 4;55(13):6563–73. *Nota: corresponding author. L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 4.9.*
- 18) Belviso B.D., Tangorra R.R., Milano F., Hassan Omar O., la Gatta S.; Ragni R., Agostiano A., Farinola G.M., Caliandro R., Trotta M. Crystallographic analysis of the photosynthetic reaction center from *Rhodobacter sphaeroides* bioconjugated with an artificial antenna *MRS Advances* 2016 1 (57): 3789–3800.
- 19) Belviso BD, Caliandro R, de Candia M, Zaetta G, Lopopolo G, Incampo F, Colucci M, Altomare CD. How a beta-D-Glucoside Side Chain Enhances Binding Affinity to Thrombin of Inhibitors Bearing 2-Chlorothiophene as P1 Moiety: Crystallography, Fragment Deconstruction Study, and Evaluation of Antithrombotic Properties. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2014 Oct 23;57(20):8563–75. *Nota: l'impact factor della rivista è 6.2.*
- 20) Favuzzi G, Tiscia G, Caliandro R, Nico G, De Stefano V, Rossi E, Za T, Gransone E, Margaglione M. Mutations within exon 8 of Protein Z gene of women with fetal loss: structural implications assessed by molecular dynamic simulations. *Journal of Thrombosis and Haemostasis*. 2013 Jul;11:1097–1097. *Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.*
- 21) Dibenedetto D, Rossetti G, Caliandro R, Carloni P. A Molecular Dynamics Simulation-Based Interpretation of Nuclear Magnetic Resonance Multidimensional Heteronuclear Spectra of alpha-Synuclein-Dopamine Adducts. *Biochemistry*. 2013 Sep 24;52(38):6672–83. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (36 WoS).*
- 22) de Candia M, Fiorella F, Lopopolo G, Carotti A, Romano MR, Lograno MD, Martel S Carrupt P-A, Belviso BD, Caliandro R, Altomare C. Synthesis and Biological Evaluation of Direct Thrombin Inhibitors Bearing 4-(Piperidin-1-yl)pyridine at the P1 Position with Potent Anticoagulant Activity. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2013 Nov 14;56(21):8696–711. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (29 WoS). L'impact factor della rivista è 6.2.*
- 23) Caliandro R, Nico G, Tiscia G, Favuzzi G, De Stefano V, Rossi E, Margaglione M, Grandone E. Structural analysis of protein Z gene variants in patients with foetal losses. *Thrombosis and Haemostasis*. 2013 Sep;110(3):534–42. *Nota: l'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 5.8.*
- 24) Caliandro R, Di Profio G, Nicolotti O. Multivariate analysis of quaternary carbamazepine-saccharin mixtures by X-ray diffraction and infrared spectroscopy. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*. 2013 May 5;78-79:269–79. *Nota: corresponding author. Articolo con un elevato numero di citazioni (35 WoS).*

- 25) Caliandro R, Belviso DB, Aresta BM, de Candia M, Altomare CD. Protein crystallography and fragment-based drug design. *Future Medicinal Chemistry*. 2013 Jun;5(10):1121–40. *Nota: [corresponding author](#).*
- 26) Caliandro R, Nico G, Tiscia GL, De Stefano V, Rossi E, Za T, Favuzzi G, Cappurri L, Fischetti L, Colaizzo D, Giuliani F, Grandone E. Structural investigation of protein Z mutations within the exon 8 in patients with fetal losses. *Thrombosis Research*. 2013 Jan;131:S76–7. *Nota: [trattasi di abstract pubblicato su rivista](#).*
- 27) Belviso BD, Caliandro R, Siliqi D, Calderone V, Arnesano F, Natile G. Structure of matrix metalloproteinase-3 with a platinum-based inhibitor. *Chemical Communications*. 2013;49(48):5492–4. *Nota: [corresponding author](#). [L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 6.7](#).*
- 28) Tiscia GL, Caliandro R, Nico G, De Stefano V, Rossi E, Za T, Favuzzi G, Cappucci F, Fischetti L, Colaizzo D, Giuliani F, Grandone E. Protein Z mutations in patients with fetal losses: Structural analysis. *Thrombosis Research*. 2012 Oct;130:S146–S146. *Nota: [trattasi di abstract pubblicato su rivista](#).*
- 29) Rossetti G, Cong X, Caliandro R, Legname G, Carloni P. Common Structural Traits across Pathogenic Mutants of the Human Prion Protein and Their Implications for Familial Prion Diseases (vol 411, pg 700, 2011). *Journal of Molecular Biology*. 2012 Sep 7;422(1):157–157. *Nota: [trattasi di un corrigendum all'articolo seguente](#).*
- 30) Rossetti G, Cong X, Caliandro R, Legname G, Carloni P. Common Structural Traits across Pathogenic Mutants of the Human Prion Protein and Their Implications for Familial Prion Diseases. *Journal of Molecular Biology*. 2011 Aug 19;411(3):700–12. *Nota: [articolo con un elevato numero di citazioni \(58 WoS\)](#). [L'impact factor della rivista è 4.7](#).*
- 31) Arnesano F, Belviso BD, Caliandro R, Falini G, Fermani S, Natile G, Siliqi D. Crystallographic Analysis of Metal-Ion Binding to Human Ubiquitin. *Chemistry-a European Journal*. 2011;17(5):1569–78. *Nota: [corresponding author](#). [L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 5.9](#).*

Studi di processi e prodotti di interesse biotecnologico.

- 1) Treppiccione, L., Mangini, V., Del Gatto, A., Trisciuzzi, D., Maurano, F., Sciancalepore, A.G., Zaccaro, L., Belviso, B.D., Nicolotti, O., Saviano, M., Rossi, M., Caliandro, R. Design, synthesis and evaluation of gluten peptide analogues as inhibitors of the HLA/DQ8-mediated celiac immune response *Food & Function* 2025, 16 (17): 6898-6909. *Nota: [corresponding author](#). [L'impact factor della rivista è 5.8](#). [Articolo non ancora presente su WoS](#).*
- 2) Fontananova, E., Pantuso, E., Donato, L., Esposito, E., Rizzi, R., Caliandro, R., Di Profilo, G. Turning mine-tailing streams into sources of water and mineral salts in a membrane-sustained circular scenario *npj Clean Water* 2024, 7 (1), 112. *Nota: [L'impact factor della rivista è 11.4](#). [Articolo non ancora presente su WoS](#).*
- 3) Mangini, V., Rosini, E., Caliandro, R., Mangiatordi, G.F., Delre, P., Sciancalepore, A.G., Pollegioni, L., Haidukowski, M., Mazzorana, M., Sumarah, M.W., Renaud, J.B., Flaig, R., Mulè, G., Belviso, B.D., Loi, M. DypB peroxidase for aflatoxin removal: new insights into the toxin degradation process *Chemosphere* 2024, 349, 140826. *Nota: [L'impact factor della rivista è 8.1](#). [Articolo non ancora presente su WoS](#).*
- 4) Parisse, G., Narzi, D., Belviso, B.D., Capriati, V., Caliandro, R., Trotta, M., Guidoni, L. Unveiling the influence of hydrated deep eutectic solvents on the dynamics of water-soluble proteins *The Journal of Physical Chemistry B* 2023, 127 (29): 6487-99. *Nota: [corresponding author](#).*
- 5) Rajoub, N., Gerard, C.J.J., Pantuso, E., Fontananova, E., Caliandro, R., Belviso, B.D., Curcio, E., Nicoletta, F.P., Pullen, J., Chen, W., Heng, J.Y.Y, Ruane, S., Liddell, J., Alvey, N., Ter Horst, J.H., Di Profio, G. A workflow for the development of template-assisted membrane crystallization downstream processing for monoclonal antibody purification *Nature Protocols* 2023, 18 (10), 2998-3049. *Nota: [l'impact factor della rivista è 16.0](#).*

- 6) Yang H, Belviso BD, Li X, Chen W, Mastropietro TF, Di Profio G, Caliandro R, Heng JYY. Optimization of Vapor Diffusion Conditions for Anti-CD20 Crystallization and Scale-Up to Meso Batch. *Crystals*. 2019 May;9(5):230. [Nota: corresponding author.](#)
- 7) Belviso BD, Caliandro R, Salehi SM, Di Profio G, Caliandro R. Protein Crystallization in Ionic-Liquid Hydrogel Composite Membranes. *Crystals*. 2019 May;9(5):253. [Nota: corresponding author.](#)
- 8) Salehi SM, Manju AC, Belviso BD, Portugal CAM, Coelho IM, Mirabelli V, Fontananova E, Caliandro R, Crespo JG, Curcio E, Di Profio G Hydrogel Composite Membranes Incorporating Iron Oxide Nanoparticles as Topographical Designers for Controlled Heteronucleation of Proteins. *Crystal Growth & Design*. 2018 Jun;18(6):3317–27.
- 9) Mirabelli V, Salehi SM, Angiolillo L, Belviso BD, Conte A, Del Nobile MA, Di Profio G, Caliandro R. Enzyme Crystals and Hydrogel Composite Membranes as New Active Food Packaging Material. *Global Challenges*. 2018 Jan 22;2(1):1700089. [Nota: corresponding author. L'impact factor della rivista è 6.9.](#)
- 10) Padalino L, Caliandro R, Chita G, Conte A, Del Nobile MA. Study of drying process on starch structural properties and their effect on semolina pasta sensory quality. *Carbohydrate Polymers*. 2016 Nov 20;153:229–35. [Nota: l'impact factor della rivista è 12.5.](#)
- 11) Di Profio G, Salehi SM, Caliandro R, Guccione P, Nico G, Curcio E, Fontananova E. Bioinspired Synthesis of CaCO₃ Superstructures through a Novel Hydrogel Composite Membranes Mineralization Platform: A Comprehensive View. *Advanced Materials*. 2016 Jan 27;28(4):610–6. [Nota: articolo con un elevato numero di citazioni \(32 WoS\). L'impact factor della rivista è 26.8.](#)
- 12) Di Profio G, Polino M, Nicoletta FP, Belviso BD, Caliandro R, Fontananova E, De Filpo G, Curcio E, Drioli E. Tailored Hydrogel Membranes for Efficient Protein Crystallization. *Advanced Functional Materials*. 2014 Mar;24(11):1582–90. [Nota: articolo con un elevato numero di citazioni \(44 WoS\). L'impact factor della rivista è 19.0.](#)
- 13) Caliandro R, Libutti A, Belviso BD, Chita G, Monteleone M. CHARACTERIZATION OF PLANT BIOMASS DERIVED BLACK CARBON (BIOCHAR) AS SOIL AMENDMENT BY X RAY POWDER DIFFRACTION. Hoffman C, Baxter D, Maniatis K, Grassi A, Helm P, editors. 2014. [Nota: trattasi di contributo in volume.](#)
- 14) Bafunno V, Bury L, Tiscia GL, Fierro T, Favuzzi G, Caliandro R, Sessa F, Grandone E, Margaglione M, Gresele P. A novel congenital dysprothrombinemia leading to defective prothrombin maturation. *Thrombosis Research*. 2014 Nov;134(5):1135–41.
- 15) Rizzuti A, Caliandro R, Gallo V, Mastrorilli P, Chita G, Latronico M. A combined approach for characterisation of fresh and brined vine leaves by X-ray powder diffraction, NMR spectroscopy and direct infusion high resolution mass spectrometry. *Food Chemistry*. 2013 Dec 1;141(3):1908–15. [Nota: l'impact factor della rivista è 7.5.](#)
- 16) Di Profio G, Reijonen MT, Caliandro R, Guagliardi A, Curcio E, Drioli E. Insights into the polymorphism of glycine: membrane crystallization in an electric field. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2013;15(23):9271–80. [Nota: L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 4.2.](#)
- 17) Belviso BD, Italiano F, Caliandro R, Carrozzini B, Costanza A, Trotta M. Cobalt binding in the photosynthetic bacterium *R. sphaeroides* by X-ray absorption spectroscopy. *Biometals*. 2013 Oct;26(5):693–703. [Questo articolo è stato messo in evidenza nel volume "ANKA Highlights 20013-2014" redatto dal Karlsruhe Institute of Technology \(KIT\) per raccogliere le ricerche più rappresentative eseguite utilizzando la ANKA Synchrotron Radiation Facility, con un articolo dal titolo "Unravelling Cobalt Binding to Photosynthetic Bacterium by X-ray Absorption Spectroscopy" \(pags.6-7\).](#)
- 18) Caridi A, Di Profio G, Caliandro R, Guagliardi A, Curcio E, Drioli E. Selecting the Desired Solid Form by Membrane Crystallizers: Crystals or Cocrystals. *Crystal Growth & Design*. 2012 Sep;12(9):4349–56. [Nota: l'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 4.7.](#)
- 19) Cardinali A, D'Antuono I, Belviso BD, Caliandro R. Computational studies on a new cationic

- peroxidase isoenzyme from artichoke leaves (vol 49, pg 395, 2011). Bioengineered. 2012 Feb;3(1):60–6. *Nota: corresponding author.*
- 20) Caliandro R, Rossetti G, Carloni P. Local Fluctuations and Conformational Transitions in Proteins. Journal of Chemical Theory and Computation. 2012 Nov;8(11):4775–85. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (34 WoS). L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 5.4.*
- 21) Di Profio G, Grosso V, Caridi A, Caliandro R, Guagliardi A, Chita G, Curcio E, Drioli E. Direct production of carbamazepine-saccharin cocrystals from water/ethanol solvent mixtures by membrane-based crystallization technology. Crystengcomm. 2011;13(19):5670–3.
- 22) Di Profio G, Caridi A, Caliandro R, Guagliardi A, Curcio E, Drioli E. Fine Dosage of Antisolvent in the Crystallization of L-Histidine: Effect on Polymorphism. Crystal Growth & Design. 2010 Jan;10(1):449–55. *Nota: l'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 4.4.*
- 23) de Virgilio M, Lombardi A, Caliandro R, Fabbrini MS. Ribosome-Inactivating Proteins: From Plant Defense to Tumor Attack. Toxins. 2010 Nov;2(11):2699–737. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (124 WoS).*

Fisica delle alte energie

- 1) Antinori F, Bacon PA, Badala A, Barbera R, Belogianni A, Bloodworth IJ, et al. Strangeness enhancements at central rapidity in 40 A GeV/c Pb-Pb collisions. Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics. 2010 Apr;37(4):045105. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (35 WoS)*
- 2) Antinori F, Bacon P, Badala A, Barbera R, Belogianni A, Bloodworth IJ, et al. Expansion dynamics of Pb-Pb collisions at 40 A GeV/c viewed by negatively charged hadrons. Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics. 2007 Mar;34(3):403–29.
- 3) Antinori F, Bacon P, Badala A, Barbera R, Belogianni A, Bloodworth IJ, et al. Transverse dynamics of Pb-Pb collisions at 40 A GeV/c viewed by strange hadrons. Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics. 2006 Nov;32(11):2065–80.
- 4) Antinori F, Bacon P, Badala A, Barbera R, Belogianni A, Bloodworth I, et al. NA57 results. In: Simak V, Sumbera M, Todorova S, Tomasik B, editors. Multiparticle Dynamics. 2006. p. 333 – 8. *Nota: trattasi di contributo in volume.*
- 5) Antinori F, Bacon P, Badala A, Barbera R, Belogianni A, Beusch W, et al. Enhancement of hyperon production at central rapidity in 158 A GeV/c Pb-Pb collisions. Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics. 2006 Apr;32(4):427–41. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (110 WoS).*
- 6) Antinori F, Bacon PA, Badala A, Barbera R, Belogianni A, Bloodworth IJ, et al. Lambda and Omega(-) polarization in Pb plus Pb collisions at 160 A GeV/c. In: Brambilla N, Devoto A, Prospero GM, DAlesio U, Maung K, Serici S, editors. Quark Confinement and the Hadron Spectrum VI. 2005. p. 428–32. *Nota: trattasi di contributo in volume.*
- 7) Antinori F, Bacon PA, Badala A, Barbera R, Belogianni A, Bloodworth IJ, et al. Central-to-peripheral nuclear modification factors in Pb-Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}}=17.3$ GeV. Physics Letters B. 2005 Sep 8;623(1-2):17–25. *Nota: L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 5.3.*
- 8) Antinori F, Bacon P, Badala A, Barbera R, Belogianni A, Bloodworth IJ, et al. Rapidity distributions around mid-rapidity of strange particles in Pb-Pb collisions at 158 A GeV/c. Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics. 2005 Nov;31(11):1345–57.
- 9) Antinori F, Bacon P, Badala A, Barbera R, Belogianni A, Bhasin A, et al. Multiplicity of charged particles in Pb-Pb collisions at SPS energies. Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics. 2005 May;31(5):321–35.
- 10) Jacholkowski, A; Antinori, F; Bacon, P; Badalà, A; Barbera, R; Belogianni, A; Bhasin, et al.,

- Multiplicity of charged particles in Pb-Pb collisions at SPS energies 2005 Journal of Phys.: Conference Series 5 64. *Nota: trattasi di abstract pubblicato su rivista.*
- 11) Helstrup H, Antinori F, Bacon PA, Badala A, Barbera R, Belogianni A, et al. Hyperon production in lead-lead interactions at 40 and 160 A GeV/c. European Physical Journal C. 2004 Jul;33:S618–20. *Nota: l'impact factor della rivista è 24.1.*
 - 12) Antinori F, Bacon PA, Badala A, Barbera R, Belogianni A, Bhasin A, et al. Energy dependence of hyperon production in nucleus-nucleus collisions at SPS. Physics Letters B. 2004 Aug 12;595:68–74. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (75 WoS). L'impact factor della rivista nell'anno di pubblicazione era 4.6.*
 - 13) Antinori F, Bacon P, Badala A, Barbera R, Belogianni A, Bhasin A, et al. Study of the transverse mass spectra of strange particles in Pb-Pb collisions at 158 A GeV/c. Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics. 2004 Jun;30(6):823–40. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (35 WoS)*
 - 14) Antinori F, Badala A, Barbera R, Belogianni A, Bhasin A, Bloodworth IJ, et al. Hyperon yields in Pb-Pb collisions from the NA57 experiment. Bentvelsen S, DeJong P, Koch J, Laenen E, editors. 2003. *Nota: trattasi di contributo in volume.*
 - 15) Carrer N, Antinori F, Badala A, Barbera R, Bhasin A, Bloodworth IJ, et al. First results on strange baryon production from the na57 experiment. Nuclear Physics A. 2002 Feb 11;698:118C – 126C.
 - 16) Virgili T, Antinori F, Badala A, Barbera R, Bloodworth IJ, Botje M, et al. Study of the production of strange and multi-strange particles in lead-lead interactions at the CERN SPS: the NA57 experiment. Nuclear Physics A. 2001 Jan 29;681:165C – 173C.
 - 17) Fini RA, Antinori F, Beusch W, Bloodworth IJ, Caliandro R, Carrer N, et al. Strange baryon production in Pb-Pb collisions at 158 A GeV/c. Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics. 2001 Mar;27(3):375–81.
 - 18) Fini RA, Antinori F, Bakke H, Beusch W, Bloodworth IJ, Caliandro R, et al. Strange particle production in p-Be, p-Pb, Pb-Pb at 158 A GeV/c (WA97 experiment). Nuclear Physics A. 2001 Jan 29;681:141C – 148C.
 - 19) Carrer N, Badala A, Barbera R, Beusch W, Bloodworth IJ, Bruno G, et al. Determination of the event centrality in the WA97 and NA57 experiments. Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics. 2001 Mar;27(3):391–6.
 - 20) Antinori F, Beusch W, Bloodworth IJ, Caliandro R, Carrer N, Di Bari D, et al. Multistrange baryon production in heavy ion reactions at the SPS. Nuclear Physics A. 2001 Mar 26;685:407C – 413C.
 - 21) Antinori F, Beusch W, Bloodworth IJ, Bruno GE, Caliandro R, Carrer N, et al. Centrality dependence of the expansion dynamics in Pb-Pb collisions at 158 A GeV c(-1). Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics. 2001 Nov;27(11):2325–44.
 - 22) Antinori F; Bakke, H; Beusch, W; Bloodworth, IJ; Caliandro, R; Carrer et al. Multi-strange particle enhancements in Pb-Pb interactions at 158 GeV/c per nucleon High Energy Physics vol I and vol II 2001 578-582. *Nota: trattasi di contributo in volume.*
 - 23) Evans D, Antinori F, Bakke H, Beusch W, Bloodworth IJ, Caliandro R, et al. Enhancement of strange and multi-strange baryons in central Pb-Pb interactions at 158 GeV/c per nucleon. Nuclear Physics A. 2000 Jan 31;663:717C – 720C.
 - 24) 150. Antinori F, Bakke H, Beusch W, Bloodworth IJ, Caliandro R, Carrer N, et al. Strange and multi-strange baryon production at SPS as a probe of QGP formation. In: Parsa Z, Marciano WJ, editors. Intersections of Particle and Nuclear Physics. 2000. p. 363–8. *Nota: trattasi di contributo in volume.*
 - 25) Antinori F, Bakke H, Beusch W, Bloodworth IJ, Caliandro R, Carrer N, et al. Transverse mass spectra of strange and multi-strange particles in Pb-Pb collisions at 158 A GeV/c. European Physical Journal C. 2000 Jun;14(4):633–41. *Nota: articolo con un elevato numero di citazioni (73 WoS).*

- 26) Antinori F, Badala A, Barbera R, Bloodworth IJ, Botje M, Caliandro R, et al. Probing the specific entropy produced in ultra-relativistic heavy-ion collisions with a silicon pixel multiplicity detector: a simulation study. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section a-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment*. 2000 Sep 21;452(1-2):323–37.
- 27) Antinori F, Badala A, Bakke H, Barbera R, Beker H, Beusch W, et al. Determination of the number of wounded nucleons in Pb plus Pb collisions at 158 A GeV/c. *European Physical Journal C*. 2000 Dec;18(1):57–63.
- 28) Antinori F; Bakke H; Beusch W; Bloodworth IJ; Caliandro R; Carrer N et al. Production of strange and multistrange hadrons in nucleus-nucleus collisions at the SPS nuclear Physics A 1999 Dec; 661: 130C-139C. *Nota: [articolo con un elevato numero di citazioni \(98 WoS\)](#)*.
- 29) Vigili T, Andersen E, Antinori F, Armenise N, Bakke H, Ban J, et al. Strange baryon production in p-Pb collisions at 158 GeV/c: a comparison with VENUS model. *Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics*. 1999 Feb;25(2):345–9.
- 30) Manzari V, Antinori F, Badala A, Barbera R, Beker H, Bloodworth IJ, et al. Experiment NA57 at the CERN SPS. *Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics*. 1999 Feb;25(2):473–9. *Nota: [articolo con un elevato numero di citazioni \(43 WoS\)](#)*
- 31) Jacholkowski A, Andersen E, Antinori F, Armenise N, Bakke H, Ban J, et al. Di-V-0 events in Pb-Pb collisions at 158 A GeV/c. *Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics*. 1999 Feb;25(2):423–8.
- 32) Evans D, Andrighetto A, Antinori F, Bayes AC, Beusch W, Bohm SJ, et al. Enhancement of strange and multi-strange hyperons and anti-hyperons in S-S and S-W interactions at 200 GeV/c. *Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics*. 1999 Feb;25(2):209–16.
- 33) Caliandro R, Andersen E, Antinori F, Armenise N, Bakke H, Ban J, et al. Lambda, Xi and Omega production at mid-rapidity in Pb-Pb and p-Pb collisions at 158 A GeV/c. *Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics*. 1999 Feb;25(2):171–80. *Nota: [articolo con un elevato numero di citazioni \(62 WoS\)](#)*
- 34) Antinori F, Barnes RP, Bayes AC, Beusch W, Caliandro R, de la Cruz B, et al. Enhancement of strange and multi-strange baryons and anti-baryons in SW interactions at 200 GeV/c. *Physics Letters B*. 1999 Feb 4;447(1-2):178–82.
- 35) Antinori F, Bakke H, Beusch W, Bloodworth IJ, Caliandro R, Carrer N, et al. Strangeness enhancement at midrapidity in Pb-Pb collisions at 158 A GeV/c: A comparison with VENUS and RQMD models. *European Physical Journal C*. 1999 Nov;11(1):79–88.
- 36) Antinori F, Badala A, Barbera R, Beker H, Bloodworth IJ, Botje M, et al. Silicon pixel detectors for tracking in NA57. *Nuclear Physics A*. 1999 Dec 27;661:716C – 720C.
- 37) Andersen E, Antinori F, Armenise N, Bakke H, Ban J, Barberis D, et al. Strangeness enhancement at mid-rapidity in Pb-Pb collisions at 158 A GeV/c. *Physics Letters B*. 1999 Mar 11;449(3-4):401–6. *Nota: [articolo con un elevato numero di citazioni \(205 WoS\)](#)*.
- 38) Caliandro R. Hyperon production in proton-lead and lead-lead collisions at 158 GeV/c per nucleon. *Czechoslovak Journal of Physics*. 1998;48:69–74.
- 39) Andersen E, Antinori F, Armenise N, Bakke H, Ban J, Barberis D, et al. Enhancement of central Delta, Xi and Omega yields in Pb-Pb collisions at 158 A GeV/c. *Physics Letters B*. 1998 Aug 6;433(1-2):209–16. *Nota: [articolo con un elevato numero di citazioni \(165 WoS\)](#)*.
- 40) Andersen E, Antinori F, Armenise N, Bakke H, Ban J, Barberis D, et al. Lambda, Xi and Omega enhancement at central rapidity in Pb-Pb collisions at 158 A GeV/c. *Nuovo Cimento Della Societa Italiana Di Fisica a-Nuclei Particles and Fields*. 1998 Sep;111(8-9):955–62.
- 41) Andersen E, Andrighetto A, Antinori F, Armenise N, Ban J, Barberis D, et al. Strange and multistrange baryon production in Pb-Pb collisions at 158 A GeV/c. *Nuclear Physics A*. 1998 Feb 16;630(1-2):582C – 588C.

- 42) Antinori F, Barnes RP, Bayes AC, Beusch W, Caliandro R, delaCruz B, et al. Pion and proton production in proton-tungsten and sulphur-tungsten interactions at 200 GeV/c per nucleon. Physics Letters B. 1997 Oct 30;412(3-4):407–13.
- 43) Abatzis S, Andrighetto A, Antinori F, Barnes RP, Bayes AC, Benayoun M, et al. Hyperon production in proton-tungsten interactions at 200 GeV/c. Physics Letters B. 1997 Feb 6;393(1-2):210–6.

E' stato citato nei ringraziamenti delle seguenti pubblicazioni scientifiche:

Fundamentals of Crystallography – Third Edition, edited by C. Giacovazzo, 2011 Oxford Science Publications, ISBN 978-0-19-957365-3. Testo ringraziamento: from D. Viertbo and M. Milanesio to A. Altomare, R. Caliandro, G.L. Cascarano and B. Carrozzini for useful and illuminating discussions on several parts

A. Bialas, “Quark model and strange baryon production in heavy ion collisions” Physics Letters B 442 (1998) p 449-452. Testo ringraziamento: The discussions with F. Beccatini, R. Caliandro, R. Lietava, E. Quercigh, J. Rafelski and K. Zalewski are highly appreciated.

Studi musicali

1985: Diploma di Teoria e Solfeggio, conseguito presso il Conservatorio di Bari.

1986: Diploma di V anno di pianoforte, conseguito presso il Conservatorio di Matera.

1987: Diploma di Armonia, conseguito presso il Conservatorio di Bari.

Sport agonistico

1984-2004: canottaggio, livello internazionale, categorie senior B, A e pesi leggeri.

dal 2005: podismo, livello nazionale, categoria master.

Bari, il 3 novembre 2025

Rocco Caliandro

