

Curriculum Vitae

INFORMAZIONI PERSONALI Laura Zanetti Polzi

POSIZIONE ATTUALE Assegnista di ricerca / Post-Doc presso il Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche dell'Università degli Studi dell'Aquila

Responsabile scientifico: Prof. Isabella Daidone

ESPERIENZA PROFESSIONALE

Marzo 2016 – Febbraio 2017 **Assegnista di Ricerca**

Dipartimento di Scienze fisiche e chimiche – Università degli Studi dell'Aquila.

L'assegno di ricerca è stato assegnato a seguito di un bando competitivo finanziato dall'Università degli Studi dell'Aquila. Titolo del progetto di ricerca: "Theoretical Modeling for Bioelectrochemistry: Computational Design of Biofuel Cells"

Responsabile scientifico: Prof. Isabella Daidone

Marzo 2013 – Febbraio 2016 **Assegnista di Ricerca**

Centro S3, "CNR Istituto Nanoscienze", Modena

Responsabile scientifico: Dott. Stefano Corni

Marzo 2012 – Febbraio 2013 **Assegnista di Ricerca**

Dipartimento di Scienze fisiche e chimiche – Università degli Studi dell'Aquila

Responsabile scientifico: Prof. Massimiliano Aschi

Agosto 2011 – Febbraio 2012 **Congedo per maternità**

Giugno 2010 – Luglio 2011 **Assegnista di Ricerca**

Centro Interuniversitario sulle Interazioni tra Campi Elettromagnetici e Biosistemi
Università di Genova

Responsabili scientifici: Prof. Alfredo di Nola, Prof. Guglielmo D'Inzeo

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

Novembre 2006 – Aprile 2010 **Dottorato di Ricerca in Biofisica**

Dipartimento di Chimica, Università di Roma "La Sapienza"

Tesi: "Molecular dynamics, quantum mechanics and statistical mechanics study of two Gramicidin S analogues and Syringomycin E"

Responsabile scientifico: Prof. Alfredo Di Nola

Congedo per maternità da Luglio a Dicembre 2008

Febbraio 2006 **Laurea in Fisica**

110/110

Dipartimento di Fisica, Università di Roma "La Sapienza"

Tesi: "Studio strutturale e conformazionale del meccanismo d'aggregazione della calcitonina in presenza di membrane lipidiche modello"

Relatori: Prof. Carlo Coluzza, Dott. Marco Diociaiuti (Istituto Superiore di Sanità)

COMPETENZE PERSONALI

Lingua madre	Italiano				
Altre lingue	COMPRESIONE		PARLATO		PRODUZIONE SCRITTA
	Ascolto	Letture	Interazione	Produzione orale	
Inglese	Ottimo	Ottimi	Ottimo	Ottimo	Buono
Spagnolo	Ottimo	Ottimo	Ottimo	Ottimo	Buono
Tedesco	Scolastico	Scolastico	Scolastico	Scolastico	Scolastico

Competenze professionali

Linguaggi di Programmazione: Fortran 77/90, Perl
Software scientifici: Gromacs, Gaussian, Vmd, Molden, Grace
Software generici: Open Office, Microsoft Office, Latex
Sistemi operativi: Unix/linux, Windows

Interessi di Ricerca

- Studio teorico di sistemi molecolari e macromolecolari con metodi ibridi classico/quantistici
- Reazioni di trasferimento elettronico in sistemi biomolecolari in generale ed in particolare in proteine
- Calcolo di spettri infrarossi ed UV/VIS e studio della loro correlazione con l'organizzazione strutturale ed il comportamento dinamico di sistemi biomolecolari

ULTERIORI INFORMAZIONI

Conferenze e Seminari selezionati

- 28/03/2017: Seminario su invito, Dipartimento di Scienze Chimiche, Università degli Studi di Padova.
- 11-16/06/2017: Presentazione Orale, "Colloquium Spectroscopicum Internationale XL", Pisa.
- 14-16/12/2015: Presentazione Orale, "III Conferenza Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale" della Società Chimica Italiana, Roma.
- 18-22/01/2015: Presentazione Orale, "583. WE-Heraeus-Seminar in Electrochemical Surface Science", Bad Honnef, Germany.
- 27-28/08/2014: Relatore su Invito, "2 nd International Conference on Self Assembly and Molecular Electronics", Alborg, Denmark.
- 19/09/2012: Seminario su invito, Centro S3, Istituto di Nanoscienze, CNR, Modena.
- 28/06/2012: Presentazione Orale: II Conferenza Nazionale "Interazioni tra Campi Elettromagnetici e Bisistemi", Bologna.
- 24-26/05/2010: Presentazione Orale: "8th Workshop on Molecular Theories and Simulations", Gaeta.
- 16-18/05/2008: Presentazione Orale: "7th Workshop on Molecular Theories and Simulations", Gaeta.

Pubblicazioni

1. Daidone I., Amadei A., Aschi M. and **Zanetti-Polzi L.** "On the Nature of Solvatochromic Effect: the Riboflavin Absorption Spectrum as a Case Study"
Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy
Under Review (2017).
2. **Zanetti-Polzi L.**, Battistuzzi G., Borsari M., Pignataro M., Paltrinieri L., Daidone I. and Bortolotti C. A. "Computational investigation of the electron transfer complex between neuroglobin and cytochrome c"
Supramolecular Chemistry 29(11), 846-852 (2017).
3. **Zanetti-Polzi L.**, Davis C. M., Gruebele M., Dyer R. B., Amadei A. and Daidone I. "Parallel folding pathways of Fip35 WW domain explained by infrared spectra and their computer simulation" *FEBS Letters* 591(20), 3265-3275(2017)
4. **Zanetti-Polzi L.**, Aschi M., Amadei A. and Daidone I. "Alternative Electron Transfer Channels Ensure Ultrafast Deactivation of Light-Induced Excited States in Riboflavin Binding Protein"
The Journal of Physical Chemistry Letters 8 (14), 3321-3327 (2017).

5. Paltrinieri L., Di Rocco G., Battistuzzi G., Borsari M., Sola M., Ranieri A., **Zanetti-Polzi L.**, Daidone I. and Bortolotti C. A. "Computational evidence support the hypothesis of neuroglobin also acting as an electron transfer species"
JBIC Journal of Biological Inorganic Chemistry 22 (4), 615-623 (2017).
6. **Zanetti-Polzi L.**, Aschi M., Daidone I. and Amadei A. "Theoretical modeling of the absorption spectrum of aqueous riboflavin"
Chemical Physics Letters 669, 119-124 (2017).
7. Daidone I., **Zanetti-Polzi L.**, Thukral L., Alekozai E. M. and Amadei A. "Theoretical-computational characterization of the temperature-dependent folding thermodynamics of a β -hairpin peptide"
Chemical Physics Letters 659, 247-251 (2016).
8. **Zanetti-Polzi L.**, Corni S., Daidone I. and Amadei A. "Extending the essential dynamics analysis to investigate molecular properties: application to the redox potential of proteins"
Physical Chemistry Chemical Physics 18 (27), 18450-18459 (2016).
9. **Zanetti-Polzi L.** and Corni S. "A dynamical approach to non-adiabatic electron transfers at the bio-inorganic interface"
Physical Chemistry Chemical Physics 18(15): 10538-10549 (2016).
10. **Zanetti-Polzi L.**, Bortolotti C.A., Daidone I., Aschi M., Amadei A. and Corni S. "A few key residues determine the high redox potential shift in azurin mutants."
Organic & Biomolecular Chemistry 13(45): 11003-11013 (2015).
11. **Zanetti-Polzi L.**, Daidone I., Bortolotti C. A. and Corni S. "Surface Packing Determines the Redox Potential Shift of Cytochrome c Adsorbed on Gold."
Journal of the American Chemical Society 136(37): 12929-12937 (2014).
12. **Zanetti-Polzi L.**, Aschi M., Amadei A. and Daidone I. "Simulation of the amide I infrared spectrum in photoinduced peptide folding/unfolding transitions."
The Journal of Physical Chemistry B ; 117(41): 12383-12390 (2013).
13. **Zanetti-Polzi L.**, Marracino P., Aschi M., Daidone I., Fontana A., Apollonio F., Liberti M., D'Inzeo G. and Amadei A. "Modeling triplet flavin-indole electron transfer and interradical dipolar interaction: a perturbative approach."
Theoretical Chemistry Accounts; 132: 1393 (2013).
14. **Zanetti-Polzi L.**, Daidone I. and Amadei A. "A theoretical reappraisal of polylysine in the investigation of secondary structure sensitivity of infrared spectra."
The Journal of Physical Chemistry B ; 116(10): 3353-3360 (2012).
15. **Zanetti-Polzi L.**, Daidone I., Anselmi M., Carchini G., Di Nola A. and Amadei A. "Analysis of infrared spectra of -hairpin peptides as derived from molecular dynamics simulations."
The Journal of Physical Chemistry B ; 115(41): 11872-11878 (2011).
16. **Zanetti-Polzi L.**, Amadei A., Aschi M. and Daidone I. "Insight into the IR-spectra/structure relationship in amyloid fibrils: a theoretical study on a Prion Peptide."
Journal of the American Chemical Society 133(30): 11414 -11417 (2011).
17. Anselmi M., Eliseo T. , **Zanetti-Polzi L.**, Fullone M. R., Fogliano V., Di Nola A., Paci M. and Grgurina I. "Structure of the lipodepsipeptide syringomycin E in phospholipids and sodium dodecylsulphate micelle studied by circular dichroism, NMR spectroscopy and molecular dynamics."
Biochimica et Biophysica Acta Biomembranes 1808: 2102-2110 (2011).
18. Amadei A., Daidone I., **Zanetti-Polzi L.** and Aschi M. "Modeling quantum vibrational excitations in condensed phase molecular systems."
Theoretical Chemistry Accounts 129: 31- 43 (2011).
19. Daidone I., Aschi M., **Zanetti-Polzi L.**, Di Nola A. and Amadei A. "On the origin of IR spectral changes upon protein folding."
Chemical Physics Letters 488: 213218 (2010).
20. **Zanetti-Polzi L.**, Anselmi M., D' Alessandro M., Amadei A. and Di Nola A. "Structural, thermodynamic and kinetic properties of Gramicidin analogue GS6 studied by molecular dynamics simulations and statistical mechanics."
Biopolymers 91(12): 1154-1160 (2009)
21. Diociaiuti M., **Zanetti-Polzi L.**, Valvo L., Malchiodi Albedi F., Bombelli C. and Gaudiano M.C. "Calcitonin forms oligomeric pore-like structures in lipid membranes."
Biophysical Journal 91(6): 2275-2281 (2006).