

Curriculum Vitae

Stefano Pieraccini è ricercatore presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano dal mese di ottobre 2008. Il suo campo di ricerca è legato all'uso di tecniche di modellistica molecolare per lo studio di biomolecole. La sua attività si è focalizzata sulla modellazione di interazioni proteina-proteina e della stabilità di proteine mediante dinamica molecolare e tecniche di calcolo di energia libera. In particolare ha studiato le interazioni proteina-proteina in protofilamenti di tubulina e microtubuli, analizzando la rete di interazioni responsabili per la polimerizzazione di questa proteina e individuando piccoli polipeptidi in grado di interferire con il self-assembly della tubulina. Ha poi studiato il meccanismo di azione di farmaci attualmente in uso che hanno come target la tubulina, in particolare la vinblastina, e lavorato allo sviluppo di molecole antitumorali partendo dalla descrizione a livello atomico dell'interfaccia di interazione tra proteine bersaglio. Inoltre ha considerato anche proteine diverse dalla tubulina, ad esempio le interleuchine in complesso con i loro recettori e piccole molecole attive. Più recentemente ha lavorato alla generalizzazione del metodo utilizzato per studiare la tubulina, che si trova nelle cellule eucariotiche, al suo analogo nei procarioti, la proteina FtsZ, che svolge una funzione simile nella duplicazione cellulare dei batteri, per progettare agenti antibatterici. Egli è anche coinvolto nello studio computazionale del problema del folding e della stabilità di proteine, con particolare riferimento all'effetto di cosolventi su polipeptidi e proteine modello, utilizzando moderne tecniche di dinamica molecolare e di enhanced sampling, come parallel tempering, umbrella sampling e metadinamica. Una ulteriore linea di ricerca che ha recentemente esplorato è la descrizione dell'interazione di legame ad alogeno attraverso metodi ab initio e di meccanica molecolare, con particolare attenzione allo sviluppo di un semplice modello per descrivere questo tipo di interazione nell'ambito di un campo di forza classico non polarizzabile per la descrizione di biomolecole. Nel corso della sua attività scientifica ha assiduamente collaborato con gruppi di chimici e biologi sperimentali, utilizzando la modellistica molecolare sia come strumento per l'interpretazione dei dati sperimentali disponibili che come mezzo per proporre nuovi approcci ai problemi di ricerca considerati. E' autore di 34 pubblicazioni su riviste internazionali con peer review, nonché autore di numerose comunicazioni a congressi nazionali e internazionali e co-titolare di una domanda di brevetto avente come oggetto "peptidi inibitori della polimerizzazione della tubulina". Segue la lista delle sue pubblicazioni.

Pubblicazioni

1. *Imidazo[2,1-b]benzothiazol derivatives as potential allosteric inhibitors of the glucocorticoid receptor*, M.S. Christodoulou, F. Dapiaggi, F. Ghiringhelli, S. Pieraccini, M. Sironi, M. Lucafò, D. Curci, . Decorti, G. Stocco, C.S. Chirumamilla, W. Vanden Berghe, P. Balaguer, B.Y. Michel, A. Burger, E.M. Beccalli, D. Passarella, N. Martinet, *ACS Med. Chem. Lett.* 9, 33 (2018).
2. *Computer aided design and NMR characterization of an oligopeptide targeting the Ebola virus VP24 protein*, F. Dapiaggi, S. Pieraccini, D. Potenza, F. Vasile, H. Macut, S. Pellegrino, A. Aliverti, M. Sironi, *New Journal of Chemistry*, 41, 4308 (2017).
3. *Assessment of DFT Functionals for QTAIM Topological Analysis of Halogen Bonds with Benzene*, A. Forni, S. Pieraccini, D. Franchini, M. Sironi, *The Journal of Physical Chemistry A*, 120, 9071 (2016).
4. *α -Synuclein is a novel microtubule dynamase*, D. Cartelli, A. Aliverti, A. Barbiroli, C. Santambrogio, E. M. Ragg, F.V.M. Casagrande, F. Cantele, S. Beltramone, J. Marangon, C. De Gregorio, V. Pandini, M. Emanuele, E. Chieriegatti, S. Pieraccini, S. Holmqvist, L. Bubacco, L. Roybon, G. Pezzoli, R. Grandori, I. Arnal, G. Cappelletti, *Scientific Reports*, 6, 3289 (2016).

5. *Synthesis of Pironetin-Dumetorine Hybrids as Tubulin Binders*, C. Marucci, M.S. Christodoulou, S. Pieraccini, M. Sironi, F. Dapiaggi, D. Cartelli, A.M. Calogero, G. Cappelletti, C. Vilanova, S. Gazzola, G. Broggin, D. Passarella, *European Journal of Organic Chemistry*, **11**, 2029 (2016).
6. *4-(1, 2-diarylbut-1-en-1-yl) isobutyranilide derivatives as inhibitors of topoisomerase II*, M.S. Christodoulou, M. Zarate, F. Ricci, G. Damia, S. Pieraccini, F. Dapiaggi, M. Sironi, L. Lo Presti, A. N. García-Argáez, L. Dalla Via, D. Passarella, *European journal of medicinal chemistry*, **118**, 79 (2016).
7. *In silico study of VP35 inhibitors: from computational alanine scanning to essential dynamics*, F. Dapiaggi, S. Pieraccini, M. Sironi, *Molecular Biosystems* **11**, 2152 (2015).
8. *Boehmeriasin A as new lead compound for the inhibition of topoisomerase and SIRT 2*, M.S. Christodoulou, F. Calogero, M. Baumann, A. N. Garcia-Argaez, S. Pieraccini, M. Sironi, F. Dapiaggi, R. Bucci, G. Broggin, S. Gazzola, S. Liekens, A. Silvani, M. Lahtela-Kakkonen, N. Martinet, A. Noell-Canals, E. Santamaria-Navarro, I.R. Baxendale, L. Dalla Via, D. Passarella, **92**, 766 (2015).
9. *Halogen bonds with benzene: An assessment of DFT functionals*, A. Forni, S. Pieraccini, S. Rendine, M. Sironi, *Journal of Computational Chemistry*, **35**, 386 (2014).
10. *Electrophysiological and metabolic effects of CHF5074 in the hippocampus: Protection against in vitro ischemia*, ischemia, D. Mango, G. Barbato, S. Piccirilli, M.B. Panico, M. Feligioni, C. Schepisi, M. Graziani, V. Porrini, M. Benarese, A. Lanzillotta, M. Pizzi, S. Pieraccini, M. Sironi, F. Blandini, F. Nicoletti, N.B. Mercuri, B.P. Imbimbo, R. Nisticò, *Pharmacological Research*, **81**, 83 (2014).
11. *Development of a powerful tool for investigation of the structure and functionality of the aqueous phase of cosmetics*, L. Rigano, G. Baratto, A. Portolan, A. Semenzato, M. Meloni, A. Bonfigli, M. Sironi, S. Pieraccini, N. Lionetti, *IFSCC Magazine*, **16**, 165 (2013).
12. *Quinazolinecarboline alkaloid evodiamine as scaffold for targeting topoisomerase I and sirtuins*, M.S. Christodoulou, A. Sacchetti, V. Ronchetti, S. Caufin, A. Silvani, G. Lesma, G. Fontana, F. Minicone, B. Riva, M. Ventura, M. Lahtela-Kakkonen, E. Jarho, V. Zuco, F. Zunino, N. Martinet, F. Dapiaggi, S. Pieraccini, M. Sironi, L. Dalla Via, O., M. Gia, D. Passarella, *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, **21**, 6920 (2013).
13. *Molecular insights into the stabilization of protein-protein interactions with small molecule: The FKBP12-rapamycin-FRB case study*, S. Chaurasia, S. Pieraccini, R. De Gonda, S. Conti, M. Sironi, *Chemical Physics Letters*, **587**, 68 (2013).
14. *9-Fluorenone-2-Carboxylic Acid as a Scaffold for Tubulin Interacting Compounds*, F. Calogero, S. Borrelli, G. Speciale, M.S. Christodoulou, D. Cartelli, D. Ballinari, F. Sola, C. Albanese, A. Ciavolella, D. Passarella, G. Cappelletti, S. Pieraccini, M. Sironi, *ChemPlusChem*, **78**, 663 (2013).
15. *Modelling the effect of osmolytes on peptide mechanical unfolding*, S. Pieraccini, S. Conti, S. Chaurasia, M. Sironi, *Chemical Physics Letters*, **578**, 138 (2013).
16. *Computer aided design of FtsZ targeting oligopeptides*, S. Pieraccini, S. Rendine, C. Jobichen, P. Domadia, J. Sivaraman, P. Francescato, G. Speranza, M. Sironi, *RSC Advances*, **3**, 1739 (2013).
17. *Solvent effect on halogen bonding: The case of the I...O interaction*, A. Forni, S. Rendine, S. Pieraccini, M. Sironi, **38**, 31 (2012).
18. *Halogen-Bonding Interactions with π Systems: CCSD(T), MP2, and DFT Calculations*, A. Forni, S. Pieraccini, S. Rendine, F. Gabas, M. Sironi, *ChemPhysChem*, **13**, 4224 (2012).

19. *Camptothecin-7-yl-methanthiole: Semisynthesis and Biological Evaluation*, M.S. Christodoulou, F. Zunino, V. Zuco, S. Borrelli, D. Comi, G. Fontana, M. Martinelli, J. B. Lorens, L. Evensen, M. Sironi, S. Pieraccini, L. Dalla Via, O.M. Gia, D. Passarella, *ChemMedChem*, **7**, 2134 (2012).
20. *Molecular modeling of the inhibition of protein-protein interactions with small molecules: the IL2-IL2R α case*, S. Pieraccini, R. De Gonda, M. Sironi, *Chemical Physics Letters*, **517**, 217 (2011).
21. *A simple mechanism underlying the effect of protecting osmolytes on protein folding*, G. Saladino, M. Marenchino, S. Pieraccini, R. Campos-Olivas, M. Sironi, F.L. Gervasio, *Journal of Chemical Theory and Computation*, **7**, 3846 (2011).
22. *Halogen Bonding in ligand-receptor systems in the framework of classical force fields*, S. Rendine, S. Pieraccini, A. Forni, M. Sironi, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **16**, 19508 (2011).
23. *Metadynamics study of a β -hairpin stability in mixed solvents*, G. Saladino, S. Pieraccini, S. Rendine, T. Recca, P. Francescato, G. Speranza, M. Sironi, *Journal of the American Chemical Society*, **133**, 2897 (2011).
24. *Vinblastine perturbation of tubulin protofilament structure: a computational insight*, S. Rendine, S. Pieraccini, M. Sironi, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **12**, 15530 (2010).
25. *In silico design of tubulin targetted antimetabolic peptides*, S. Pieraccini, G. Saladino, G. Cappelletti, D. Cartelli, P. Francescato, G. Speranza, P. Manitto, M. Sironi, *Nature Chemistry*, **1**, 642, (2009).
26. *DENPOL: A new program to determine electron densities of polypeptides using extremely localized molecular orbitals*, M. Sironi, M. Ghitti, A. Genoni, G. Saladino, S. Pieraccini, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, **898**, 8 (2009).
27. *Studies on Umami Taste. Synthesis of New Guanosine 5'-Phosphate Derivatives and Their Synergistic Effect with Monosodium Glutamate* P. Cairoli, S. Pieraccini, M. Sironi, CF. Morelli, G. Speranza, P. Manitto. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, **56**, 1043 (2008).
28. *A molecular dynamics study of an Endostatin derived peptide with antiangiogenic activity and of its mutants*, S. Pieraccini, G. Saladino, M. Sironi, P. Francescato, M.G. Cattaneo, LM. Vicentini, G. Speranza, P. Manitto, *Chemical Physics Letters*, **455**, 311 (2008).
29. *Extremely localized molecular orbitals: theory and applications*, M. Sironi, A. Genoni, M. Civera, S. Pieraccini, M. Ghitti, *Theoretical Chemistry Accounts*, **117**, 685 (2007).
30. *Atomic level description of the protecting effect of osmolytes against thermal denaturation of proteins*, S. Pieraccini, L. Burgi, A. Genoni, A. Benedusi, M. Sironi. *Chemical Physics Letters*, **438**, 298 (2007).
31. *The molecular dynamics of assembly of the ubiquitous aortic medial amyloid fragment*, E. Gazit, P. Della Bruna, S. Pieraccini, G. Colombo, *Journal of Molecular Graphics & Modeling*, **25**, 903 (2007).
32. *A molecular dynamics study of human endostatin and its synthetic fragments with antiangiogenic properties*, S. Pieraccini, M. Sironi, P. Francescato, G. Speranza, L.M. Vicentini, P. Manitto, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **8**, 3066 (2006).
33. *Modeling enzymatic processes: A molecular simulation analysis of the origins of regioselectivity*, S. Pieraccini, M. Sironi, G. Colombo, *Chemical Physics Letters*, **418**, 373 (2006).

34. *A novel extremely localized molecular orbitals based technique for the one-electron density matrix computation*, A. Genoni, M. Ghitti, S. Pieraccini, M. Sironi, *Chemical Physics Letters*, **415**, 256 (2005).