

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

Procedura di valutazione per la chiamata a professore di II fascia da ricoprire ai sensi dell'art. 24, comma 6, della Legge n. 240/2010 per il settore concorsuale _03/A2- MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE

CHIMICHE_____ ,

(settore scientifico-disciplinare ____CHIM/02 - CHIMICA FISICA_____)

presso il Dipartimento di _____CHIMICA_____, Codice concorso __4186__

Stefano Pieraccini**CURRICULUM VITAE****INFORMAZIONI PERSONALI (NON INSERIRE INDIRIZZO PRIVATO E TELEFONO FISSO O CELLULARE)**

COGNOME	PIERACCINI
NOME	STEFANO
DATA DI NASCITA	10 LUGLIO 1978

Stefano Pieraccini è nato a Genova il 10 luglio 1978. Ha conseguito la laurea in chimica nell'ottobre 2002 discutendo una tesi dal titolo "Costruzione e caratterizzazione di nuovi building blocks e polimeri di coordinazione con leganti piridinici polifunzionali". Nel gennaio 2006 ha ottenuto il Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche, specializzandosi nello studio modellistico di molecole di interesse biologico. Successivamente ha svolto un assegno di ricerca di durata biennale presso il Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica dell'università degli Studi di Milano ed infine ha diventato Ricercatore Universitario nell'ottobre 2008, ottenendo la conferma nel 2011. Attualmente ricopre la posizione di Ricercatore presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano.

Il Dott. Pieraccini ha svolto la sua attività di ricerca nell'ambito della chimica computazionale e della modellistica molecolare. Si è in particolare occupato dello studio della struttura e della dinamica di proteine, anche in relazione al loro ruolo di target farmacologici. Ha applicato queste ricerche allo sviluppo di molecole bioattive ed alla comprensione del loro meccanismo di interazione con le proteine bersaglio. Ha anche approfondito il tema delle interazioni intermolecolari, sia in ambito biologico, con l'utilizzo di metodi basati su force field, che in ambito più squisitamente teorico, con l'utilizzo di metodi di calcolo quantomeccanici o ibridi.

Durante la sua attività scientifica ha assiduamente collaborato con gruppi di ricerca di biologi e chimici sperimentali, utilizzando la modellistica molecolare sia come strumento per l'interpretazione dei dati disponibili che come metodo per proporre nuovi approcci ai problemi considerati nell'ambito delle diverse ricerche di cui si è occupato. Afferisce all'Istituto di Scienze e

Tecnologie Molecolari (ISTM) del CNR ed al Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienze e la Tecnologia dei Materiali (INSTM). È Autore di 45 pubblicazioni su riviste internazionali con peer review, di numerose comunicazioni a congressi nazionali ed internazionali, nonché co-autore della domanda di brevetto “Peptides inhibitors of tubulin polymerization” (WO 2009/074271 A1).

Nei suoi 11 anni di servizio presso il Dipartimento di Chimica ha svolto attività didattica nei corsi di laurea triennale e magistrale in Chimica, nel corso di laurea triennale in Biotecnologie Industriali ed Ambientali e nel corso di laurea magistrale a ciclo unico in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche.

Di seguito vengono dettagliate la sua attività scientifica, con la descrizione dei diversi filoni di ricerca di cui si è occupato, quella didattica, con l’elenco dei corsi che ha tenuto, e quella gestionale, organizzativa e di servizio.

Attività scientifica

L’attività di ricerca del Dott. Stefano Pieraccini si è focalizzata su quattro tematiche principali, ossia lo studio di interazioni proteina-proteina mediante tecniche basate sulla dinamica molecolare, l’analisi computazionale della stabilità di peptidi e proteine in solventi misti utilizzando metodi di enhanced sampling, lo studio di interazioni ligando-proteina mediante dinamica molecolare e docking ed il modeling di interazioni intermolecolari, con particolare riferimento al legame ad alogeno, utilizzando tecniche classiche basate su forze field e calcoli quantomeccanici *ab initio*. Di seguito un sommario sintetico delle sue principali attività.

1. Studio computazionale di interazioni proteina-proteina e sviluppo di modulatori delle stesse.

L’attività di Ricerca in questo ambito ha avuto come scopo la descrizione a livello atomico del network di interazioni responsabile della formazione di complessi proteina-proteina rilevanti per la loro funzione biologica ed il design di peptidi e piccole molecole capaci di interferire con la loro formazione. Oggetto di studio è stato anche il meccanismo di azione di modulatori conosciuti di interazioni proteina-proteina per comprenderne meglio l’azione ed ottimizzarne l’attività. I sistemi oggetto di studio sono stati nella fattispecie:

- protofilamenti di tubulina e microtubuli (P37 e P38)
- filamenti di proteina FtsZ (P29)
- complessi della proteina virale VP24 del virus Ebola con la Karioferina umana (P13)
- complessi tra Interleukina-Interleukina recettore alfa (P33)
- complessi proteici umani Fkbp12-Frb (P25)

2. Modeling della stabilità di proteine in solventi misti.

Nella sua attività di ricerca Stefano Pieraccini si è occupato dello studio della stabilità di peptidi e proteine in soluzione di osmoprotettori e denaturanti, utilizzando tecniche per il calcolo di energia libera, in particolare umbrella sampling e metadinamica. Nei suoi studi ha modellato l'effetto di diversi osmoliti sulla struttura, la dinamica e la stabilità di proteine, e ha ricostruito le modifiche indotte da diversi cosolventi nella superficie di energia libera di sistemi proteici modello, come discusso nelle pubblicazioni P34, P36. Questi risultati hanno avuto anche un interesse applicativo, nell'ambito della cosmetica, aprendo la strada ad una proficua collaborazione con aziende attive nel settore, in particolare:

- Unifarco S.p.A. Contratto di ricerca commissionata per lo studio dell'effetto di osmoprotettori sulla struttura e le proprietà di acido ialuronico in soluzione (anno 2017).
- Unifaco S.p.A. Studio dell'interazione di soluzioni di osmoprotettori con cheratina (P11). Analisi computazionale della dinamica di soluzioni acquose di osmoliti di interesse cosmetico (P23). Partecipazione a 2 contratti di ricerca commissionata tra il 2010 e il 2015.
- Giuliani S.p.A. Collaborazione nell'ambito dello studio dell'effetto di osmoprotettori sulla stabilità di proteine (P42).

3. Modellazione di legame ad alogeno.

Il legame ad alogeno è stato studiato utilizzando sia metodi basati sulla meccanica quantistica che campi di forza classici. Per quanto riguarda lo studio con metodi quantomeccanici, si è concentrato sulla descrizione del legame ad alogeno in casi particolari, come le interazioni tra alogeni e sistemi aromatici e sull'effetto del solvente sul legame ad alogeno. Ha inoltre collaborato all'integrazione di dati sperimentali e computazionali concernenti sistemi con legame ad alogeno. Questa attività è descritta nelle pubblicazioni P2, P7, P9, P17, P20, P31. Per quanto riguarda l'approccio classico, ha lavorato allo sviluppo di metodi per la corretta descrizione del legame ad alogeno in sistemi di interesse biologico. La principale difficoltà in questo ambito è descrivere adeguatamente l'anisotropia del potenziale elettrostatico attorno agli atomi di alogeno facenti parte di una molecola, cosa non possibile con i force field tipicamente impiegati per la descrizione di biomolecole, dove l'elettrostatica è basata su cariche puntiformi centrate sulle posizioni atomiche. Per ovviare a questo problema, ha sviluppato un approccio basato sull'introduzione di pseudoatomi, utilizzando questi extra points per fittare correttamente il potenziale elettrostatico molecolare attorno all'atomo di alogeno. L'uso di tale approccio ha permesso di riprodurre le geometrie sperimentali di complessi

proteina-ligando alogenato con un'accuratezza comparabile a quella ottenuta con ben più costosi metodi ibridi meccanica quantistica/meccanica molecolare. Questo aspetto è descritto nelle pubblicazioni P12 e P35. Nell'ambito di questa tematica il Dott. Pieraccini ha trascorso un periodo di ricerca presso l'università di Strasburgo, ospite del gruppo del Prof. Varnek, supportato dal programma Short Term Mobility 2016 del CNR.

4. Studio computazionale di interazioni ligando-proteina.

In quest'ambito l'attività del Dott. Pieraccini è stata caratterizzata da numerose collaborazioni con gruppi di ricerca sperimentali. Ha avuto come obiettivo sia la razionalizzazione dell'attività di molecole organiche, studiando con tecniche di molecular docking e dinamica molecolare i dettagli della loro interazione con il target biologico, che il design di nuove molecole cercando di migliorarne l'attività e le proprietà. In particolare sono state approfondite le modalità di interazione di diverse molecole con i seguenti target:

- Tubulina e microtubuli (P5, P15, P27)
- Topoisomerasi (P16, P19, P24, P32)
- Proteina VP35 di Ebola (P18)
- Recettore dei Glucocorticoidi (P10)

Progetti finanziati

Negli ultimi anni il Dott. Pieraccini ha partecipato a diversi progetti di ricerca, monotematici e interdisciplinari. Di seguito l'elenco delle call cui ha partecipato con esito positivo, con la specifica del ruolo ricoperto in ciascun progetto (PI o membro del Team).

- Fondazione Regionale per la Ricerca Biomedica-Collaborative Projects-II Edition (Nuovo bando progetti in Rete)- New Frontiers of engineered nanovectors to improve treatment efficacy and safety in neurological disorders (NEVERMIND)-Team member
- Marie Skłodowska-Curie Innovative Training Networks-Call 2019-MSCA-ITN-EJD action - Tuning Tubulin Dynamics and Interactions to face Neurotoxicity: a Multidisciplinary approach for Training and Research- Team member
- FET Open - Novel ideas for radically new technologies (Call: H2020-FETOPEN-2018-2020) Novel Pesticides for Sustainable Agriculture (NoPest)-Team member
- Finanziamento delle Attività Base di Ricerca-FFABR 2017-PI
- Piano Sostegno alla Ricerca 2018-Università degli Studi di Milano-PI
- Piano Sostegno alla Ricerca 2017-Università degli Studi di Milano-PI

- Bando Cooperazione scientifica Italia-India (MAECI-Call 2017)-Development of nature inspired bivalent antitubulins as anticancer agents-Team member
- Fondazione Cariplo - Bando Ricerca integrata sulle biotecnologie industriali e sulla bioeconomia (2017) - Value added products through biocatalysis: tailored gammaglutamyltranspeptidase (TailGluTran)- Team member
- Piano Sostegno alla Ricerca 2016-Università degli Studi di Milano-PI

Attività didattica

Stefano Pieraccini ha svolto attività didattica in maniera continuativa nei corsi di laurea triennale in Chimica e magistrale in Scienze Chimiche, nel corso di laurea triennale in Biotecnologie Industriali ed Ambientali e nel corso di laurea magistrale a ciclo unico in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche. Ha inoltre contribuito all'attività didattica per il dottorato in Chimica e Chimica Industriale e lavorato allo sviluppo di collaborazioni internazionali per l'istituzione di percorsi di doppio titolo tra l'Università degli Studi di Milano, l'Université de Strasbourg e l'Université Paris Diderot (Paris VII).

Segue il dettaglio dell'attività didattica e di formazione svolta negli ultimi anni.

Attività didattica frontale svolta nell'ambito della Scuola di Dottorato

- Coordinatore del corso "Molecular Modeling of Biomolecules in Solution" tenuto nell'ambito della didattica 2014 per i corsi di Dottorato in Chimica e Chimica Industriale.
- Lezione nell'ambito del corso "Discovering Molecular Recognition and self-assembling through the lenses on non-covalent interactions" (Coordinato dal Dott. Leonardo Lo Presti) tenuto nell'ambito della didattica 2017 per i corsi di Dottorato in Chimica e Chimica Industriale.

Attività come relatore di tesi di Dottorato

- Relatore di 1 tesi di dottorato in Chimica (Bando studenti extraeuropei-XXVI ciclo)
- Relatore di 2 tesi di dottorato in Chimica Industriale (XXXII e XXXIV ciclo-attualmente in corso).

Altre attività formative post-laurea

- Responsabile scientifico di una borsa di studio per giovani promettenti erogata nell'ambito del progetto Cariplo "Value-added products through biocatalysis: tailored γ -glutamyltranspeptidases"-TailGluTran nell'anno accademico 2017-2018.

Attività didattica frontale svolta nell'ambito dei corsi di laurea

A.A. 2018-2019

Docente titolare del corso Simulation modeling of biomolecules (6 cfu-in lingua inglese) per la laurea magistrale in Scienze Chimiche

Docente del corso Chimica Fisica (4 di 6 cfu) per la laurea magistrale a ciclo unico in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche.

A.A. 2017-2018

Docente titolare del corso Simulation modeling of biomolecules (6 cfu-in lingua inglese) per la laurea magistrale in Scienze Chimiche

Docente titolare del corso Chimica Fisica (4 di 6 cfu) per la laurea magistrale a ciclo unico in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche.

A.A. 2016-2017

Docente titolare del corso Simulation modeling of biomolecules (6 cfu-in lingua inglese) per la laurea magistrale in Scienze Chimiche

Docente titolare del corso Chimica Fisica (6 cfu-Linea L-Z) per la laurea magistrale a ciclo unico in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche.

A.A. 2015-2016

Docente titolare del corso Simulation modeling of biomolecules (3 di 6 cfu-in lingua inglese) per la laurea magistrale in Scienze Chimiche

Docente titolare del corso Chimica Fisica (6 cfu-Linea L-Z) per la laurea magistrale a ciclo unico in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche.

Docente del corso Modellistica Molecolare (3 di 6 cfu) per il corso di laurea triennale in chimica

A.A. 2014-2015

Docente titolare del corso Simulation modeling of biomolecules (6 cfu-in lingua inglese) per la laurea magistrale in Scienze Chimiche

Docente titolare del corso Chimica Fisica (6 cfu-Linea L-Z) per la laurea magistrale a ciclo unico in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche.

A.A. 2013-2014

Docente titolare del corso Simulation modeling of biomolecules (cfu-in lingua inglese) per la laurea magistrale in Scienze Chimiche

Docente titolare del corso Chimica Fisica (6 cfu-Linea L-Z) per la laurea magistrale a ciclo unico in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche.

Docente del modulo “Elementi di chimica fisica” nel corso di Biochimica con Elementi di Chimica Fisica (3 di 9 cfu) per il corso di laurea in Biotecnologie Industriali ed Ambientali.

A.A. 2012-2013

Docente del modulo “Elementi di chimica fisica” nel corso di Biochimica con Elementi di Chimica Fisica (3 di 9 cfu) per il corso di laurea in Biotecnologie Industriali ed Ambientali.

Docente del corso di Laboratorio di Chimica Fisica A (3 cfu) per il corso di laurea magistrale in Scienze Chimiche.

A.A. 2011-2012

Docente del modulo “Elementi di chimica fisica” nel corso di Biochimica con Elementi di Chimica Fisica (3 di 9 cfu) per il corso di laurea in Biotecnologie Industriali ed Ambientali.

Attività come relatore e correlatore di tesi di laurea triennale e magistrale

- Relatore di 3 tesi di laurea triennale in Biotecnologie Industriali e Ambientali
- Relatore di 1 tesi di laurea magistrale in Fisica
- Correlatore di 15 tesi di laurea triennale in Chimica
- Correlatore di 9 tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche

Attività didattica internazionale

Il Dott. Pieraccini a partire dal 2011 ha lavorato alla costruzione di una collaborazione in ambito didattico tra l’Università degli Studi di Milano, l’Université de Strasbourg e l’Université Paris Diderot (Paris VII). In particolare, ha collaborato alla stesura di accordi interuniversitari che hanno portato ad integrare una serie di insegnamenti offerti dal corso di laurea magistrale in Scienze Chimiche all’interno del master internazionale “In Silico Drug Design” gestito congiuntamente dalle università di Parigi VII e Strasburgo. Successivamente ha collaborato alla creazione di un corso di laurea congiunto tra i tre atenei, volto alla formazione di esperti nelle problematiche di drug design, chimica farmaceutica, chemoinformatica e modellistica molecolare. Tale corso di laurea porta gli studenti al conseguimento del doppio titolo in Scienze Chimiche – In Silico Drug Design. Attualmente è uno dei referenti accademici per il coordinamento delle attività relative al doppio titolo. Nell’ambito di tale collaborazione ha tenuto un ciclo di lezioni sullo studio modellistico delle interazioni proteina-proteina presso l’università di Strasburgo, finanziato dal programma Erasmus per la mobilità dei docenti nell’anno accademico 2013-2014.

Attività gestionale, organizzativa e di servizio

- **2013-presente**

Membro del collegio docenti della scuola di dottorato in Chimica Industriale.

- **Ottobre 2017-presente**

Membro della giunta del Dipartimento di Chimica.

- **Ottobre 2017-presente**

Membro del Comitato di Direzione della Facoltà di Scienze e Tecnologie.

- **Settembre 2018-presente**

Membro della sottocommissione per l'aggiornamento del sito web del Dipartimento di Chimica

Lista competa delle pubblicazioni

P1) S. Marcelli, F. Iannuzzi, E. Ficulle, D. Mango, **S. Pieraccini**, S. Pellegrino, M. Corbo, M. Sironi, A. Pittaluga, R. Nisticò, M. Feligioni, The selective disruption of presynaptic JNK2/STX1a interaction reduces NMDA receptor-dependent glutamate release, *Scientific Reports*, **9**, 7146 (2019).

P2) D. Franchini, A. Genoni, F. Dapiaggi, S. Pieraccini, M. Sironi, A valence bond description of the bromine halogen bond, *International Journal of Quantum Chemistry*, **119**, e25946 (2019).

P3) E. Bonandi, P. Marzullo, F. Foschi, D. Perdicchia, L. Lo Presti, M. Sironi, S. Pieraccini, G. Gambacorta, J. Saupe, L. Dalla Via, D. Passarella, Stereodivergent Diversity-Oriented Synthesis: Exploiting the Versatility of 2-Piperidine Ethanol, *European Journal of Organic Chemistry*, **25**, 4013 (2019).

P4) S. Rendine, C. Orrenius, F. Dapiaggi, S. Pieraccini, I. Motto, R. D'Alessio, P. Magnaghi, A. Isacchi, E. Felder, M. Sironi, Molecular dynamics simulations of p97 including covalent, allosteric and ATP-competitive inhibitors, *Acta Chimica Slovenica*, **66**, 395 (2019).

P5) E. Bonandi, F. Foschi, C. Marucci, F. Dapiaggi, M. Sironi, **S. Pieraccini**, M.S. Christodoulou, F. de Asís Balaguer, J.F. Díaz, N. Zidar, D. Passarella, Synthesis of Thicolchicine-Based Conjugates: Investigation towards Bivalent Tubulin/Microtubules Binders, *ChemPlusChem*, **84**, 98 (2019).

P6) S. Pellegrino, F. Oliva, R. Bucci, L. Tamborini, **S. Pieraccini**, A. Pinto, Bicyclic pyrrolidine-isoxazoline γ amino acid: a constrained scaffold for stabilizing α -turn conformation in isolated peptides, *Frontiers in Chemistry*, **7**, 133 (2019).

P7) A. Forni, D. Franchini, F. Dapiaggi, **S. Pieraccini**, M. Sironi, P. Scilabra, T. Pilati, K.I. Petko, G. Resnati, Y.L. Yagupolkii, Featuring I \cdots N halogen bond and weaker interactions in iodoperfluoroalkylimidazoles: An experimental and theoretical charge density study, *Crystal Growth & Design*, In press, (2019).

P8) E. Gandini, F. Dapiaggi, F. Oliva, S. **Pieraccini**, M. Sironi, Well-Tempered MetaDynamics based method to evaluate universal peptidomimetics, *Chemical Physics Letters*, **706**, 729 (2018).

- P9) A. Genoni, D. Franchini, **S. Pieraccini**, M. Sironi, X-ray constrained Spin-Coupled wavefunction: a new tool to extract chemical information from X-ray diffraction data, *Chemistry–A European Journal*, **24**, 15507 (2018).
- P10) M.S. Christodoulou, F.Dapiaggi, F.Ghiringhelli, **S.Pieraccini**, M. Sironi, M. Lucafò, D. Curci, G. Decorti, G. Stocco, C.S. Chirumamilla, W. Vanden Berghe, P. Balaguer, B.Y. Michel, A. Burger, E.M. Beccalli, D. Passarella, N. Martinet, Imidazo[2,1-*b*]benzothiazol Derivatives as Potential Allosteric Inhibitors of the Glucocorticoid Receptor, *ACS medicinal chemistry letters*, **9**, 339 (2018).
- P11) G. Baratto, E. Caviola, M. Meloni, N. Lionetti, A. Bonfigli, M. Sironi, **S. Pieraccini**, M. Oliver, L. Coderch, L. Rigano, Hair Strengthening Evaluation of Anisotropic Osmolite Solutions (Inositol + Arginine): Cross-Talk between Dermal Papilla Fibroblast and Keratinocytes of the Outer Root Sheath Using a μ Hair Follicle 3D Model, *Cosmetics*, **5**, 56 (2018).
- P12) D. Franchini, F. Dapiaggi, **S. Pieraccini**, A. Forni, M. Sironi, Halogen bonding in the framework of classical force fields: The case of chlorine, *Chemical Physics Letters*, **712**, 89 (2018).
- P13) F. Dapiaggi, **S.Pieraccini**, D.Potenza, F.Vasile, H.Macut, S.Pellegrino, A.Aliverti, M.Sironi, Computer aided design and NMR characterization of an oligopeptide targeting the Ebola virus VP24 protein, *New Journal of Chemistry*, **41**, 4308, (2017).
- P14) 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. Chierigatti, **S. Pieraccini**, S. Holmqvist, L. Bubacco, L. Roybon, G. Pezzoli, R. Grandori, I. Arnal, G. Cappelletti, α -Synuclein is a novel microtubule dynamase, *Scientific Reports*, **6**, 3289 (2016).
- P15) 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, Synthesis of Pironetin–Dumetorine Hybrids as Tubulin Binders, *European Journal of Organic Chemistry*, **11**, 2029 (2016).
- P16) 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, 4-(1, 2-diarylbut-1-en-1-yl) isobutyranilide derivatives as inhibitors of topoisomerase II, *European journal of medicinal chemistry*, **118**, 79 (2016).
- P17) A. Forni, **S. Pieraccini**, D. Franchini, M. Sironi, Assessment of DFT Functionals for QTAIM Topological Analysis of Halogen Bonds with Benzene, *The Journal of Physical Chemistry A*, **120**, 9071 (2016)
- P18) F. Dapiaggi, **S. Pieraccini**, M. Sironi, In silico study of VP35 inhibitors: from computational alanine scanning to essential dynamics, *Molecular Biosystems*, **11**, 2152 (2015).
- P19) 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, Boehmeriasin A as new lead compound for the inhibition of topoisomerase and SIRT 2, *European journal of medicinal chemistry*, **92**, 766 (2015).
- P20) A. Forni, **S. Pieraccini**, S. Rendine, M. Sironi, Halogen bonds with benzene: An assessment of DFT functionals, *Journal of Computational Chemistry*, **35**, 386 (2014).
- P21) 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, *Electrophysiological and metabolic effects of CHF5074 in the hippocampus: Protection against in vitro ischemia*, ischemia, Pharmacological Research, **81**, 83 (2014).

P22) M. E Crisan, P. Bourosh, M.E. Maffei, A. Forni, **S. Pieraccini**, M. Sironi, Y.M. Chumakov, Manuela E Crisan, Paulina Bourosh, Massimo E Maffei, Alessandra Forni, Stefano Pieraccini, Maurizio Sironi, Yurii M Chumakov, Synthesis, crystal structure and biological activity of 2-hydroxyethylammonium salt of p-aminobenzoic acid, *PLoS One*, **9**, e101892 (2014).

P23) L. Rigano, G. Baratto, A. Portolan, A. Semenzato, M. Meloni, A. Bonfigli, M. Sironi, **S. Pieraccini**, N. Lionetti, Development of a powerful tool for investigation of the structure and functionality of the aqueous phase of cosmetics, *IFSCC Magazine*, **16**, 165 (2013).

P24) 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, Quinazolinecarboline alkaloid evodiamine as scaffold for targeting topoisomerase I and sirtuins, *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, **21**, 6920 (2013).

P25) S. Chaurasia, **S. Pieraccini**, R. De Gonda, S. Conti, M. Sironi, Molecular insights into the stabilization of protein-protein interactions with small molecule: The FKBP12-rapamycin-FRB case study, *Chemical Physics Letters*, **587**, 68 (2013).

P26) **S. Pieraccini**, Protein-protein interactions as a drug target: A molecular modeling approach, *La Chimica e l'industria*, 95, 126 (2013).

P27) 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, 9-Fluorenone-2-Carboxylic Acid as a Scaffold for Tubulin Interacting Compounds, *ChemPlusChem*, **78**, 663 (2013).

P28) **S. Pieraccini**, S. Conti, S. Chaurasia, M. Sironi, Modelling the effect of osmolytes on peptide mechanical unfolding, *Chemical Physics Letters*, **578**, 138 (2013).

P29) **S. Pieraccini**, S. Rendine, C. Jobichen, P. Domadia, J. Sivaraman, P. Francescato, G. Speranza, M. Sironi, Computer aided design of FtsZ targeting oligopeptides, *RSC Advances*, **3**, 1739 (2013).

P30) A. Forni, S. Rendine, **S. Pieraccini**, M. Sironi, Solvent effect on halogen bonding: The case of the I...O interaction, **38**, 31 (2012).

P31) A. Forni, **S. Pieraccini**, S. Rendine, F. Gabas, M. Sironi, Halogen-Bonding Interactions with π Systems: CCSD(T), MP2, and DFT Calculations, *ChemPhysChem*, **13**, 4224 (2012).

P32) 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, Camptothecin-7-yl-methanthiole: Semisynthesis and Biological Evaluation, *ChemMedChem*, **7**, 2134 (2012).

P33) **S. Pieraccini**, R. De Gonda, M. Sironi, Molecular modeling of the inhibition of protein-protein interactions with small molecules: the IL2-IL2Ra case, *Chemical Physics Letters*, **517**, 217 (2011).

- P34) G. Saladino, M. Marenchino, **S. Pieraccini**, R Campos-Olivas, M. Sironi, F.L. Gervasio, A simple mechanism underlying the effect of protecting osmolytes on protein folding, *Journal of Chemical Theory and Computation*, **7**, 3846 (2011).
- P35) S. Rendine, **S. Pieraccini**, A. Forni, M. Sironi, Halogen Bonding in ligand-receptor systems in the framework of classical force fields, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **16**, 19508 (2011).
- P36) G. Saladino, **S. Pieraccini**, S. Rendine, T. Recca, P. Francescato, G. Speranza, M. Sironi, Metadynamics study of a β -hairpin stability in mixed solvents, *Journal of the American Chemical Society*, **133**, 2897 (2011).
- P37) S. Rendine, **S. Pieraccini**, M. Sironi, Vinblastine perturbation of tubulin protofilament structure: a computational insight, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **12**, 15530 (2010).
- P38) **S. Pieraccini**, G. Saladino, G. Cappelletti, D. Cartelli, P. Francescato, G. Speranza, P. Manitto, M. Sironi, *In silico design of tubulin targeted antimitotic peptides*, *Nature Chemistry*, **1**, 642, (2009).
- P39) M. Sironi, M. Ghitti, A. Genoni, G. Saladino, **S. Pieraccini**, DENPOL: A new program to determine electron densities of polypeptides using extremely localized molecular orbitals, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, **898**, 8 (2009).
- P40) P. Cairolì, **S. Pieraccini**, M. Sironi, CF. Morelli, G. Speranza, P. Manitto, Studies on Umami Taste. Synthesis of New Guanosine 5'-Phosphate Derivatives and Their Synergistic Effect with Monosodium Glutamate, *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, **56**, 1043 (2008).
- P41) **S. Pieraccini**, G. Saladino, M. Sironi, P. Francescato, M.G. Cattaneo, LM. Vicentini, G. Speranza, P. Manitto, A molecular dynamics study of an Endostatin derived peptide with antiangiogenic activity and of its mutants, *Chemical Physics Letters*, **455**, 311 (2008).
- P42) M. Sironi, A. Genoni, M. Civera, **S. Pieraccini**, M. Ghitti, Extremely localized molecular orbitals: theory and applications, *Theoretical Chemistry Accounts*, **117**, 685 (2007).
- P43) **S. Pieraccini**, L. Burgi, A. Genoni, A. Benedusi, M. Sironi, Atomic level description of the protecting effect of osmolytes against thermal denaturation of proteins, *Chemical Physics Letters*, **438**, 298 (2007).
- P44) E. Gazit, P. Della Bruna, **S. Pieraccini**, G. Colombo, The molecular dynamics of assembly of the ubiquitous aortic medial amyloid medin fragment, *Journal of Molecular Graphics & Modeling*, **25**, 903 (2007).
- P45) **S. Pieraccini**, M. Sironi, P. Francescato, G. Speranza, L.M. Vicentini, P. Manitto, A molecular dynamics study of human endostatin and its synthetic fragments with antiangiogenic properties, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **8**, 3066 (2006).
- P46) **S. Pieraccini**, M. Sironi, G. Colombo, Modeling enzymatic processes: A molecular simulation analysis of the origins of regioselectivity, *Chemical Physics Letters*, **418**, 373 (2006).
- P47) A. Genoni, M. Ghitti, **S. Pieraccini**, M. Sironi, A novel extremely localized molecular orbitals based technique for the one-electron density matrix computation, *Chemical Physics Letters*, **415**, 256 (2005).