

CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	SGRIGNANI
NOME	JACOPO
DATA DI NASCITA	20/02/1979

Titoli di Studio e Formazione

- 1998 Maturità Classica presso l'Istituto M. Ficino di Figline Valdarno (Firenze).
- 28 Aprile 2005: **Laurea Specialistica in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche** presso l'Università di Firenze, con una tesi dal titolo: "Sviluppo di modelli 3D-QSAR del recettore AMPA iGluR2 attraverso metodologie dirette (*structure-based*) e indirette (*ligand-based*)" con votazione 105/110.
- Tirocinio per abilitazione alla professione di farmacista. 300 ore suddivise in sei mesi presso la farmacia "Dr. Bencivegni" Loro Ciuffenna (AR).
- Giugno 2005: **Abilitazione alla professione di Farmacista.**
- Giugno 2007-Gennaio 2008 Studente visitatore presso la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) di Trieste, settore Fisica statistica e Biologica (supervisore prof. Paolo Carloni).
- Gennaio 2006-Dicembre 2008: Dottorato di ricerca in Chimica e Tecnologia del Farmaco, presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università di Firenze (laboratorio di Molecular Modeling, Cheminformatics & QSAR), titolo della tesi: "Strumenti della modellistica molecolare applicati allo studio e ottimizzazione strutturale di composti di interesse farmaceutico", docente supervisore Prof. Paola Gratteri. Settore indicato sul frontespizio della tesi Chim/08.
- 17 Febbraio 2009, conseguimento del titolo di **Dottore di ricerca.**

Abilitazioni conseguite

- Abilitazione Scientifica Nazionale come professore di II fascia per i settori concorsuali:

-CHIMICA E TECNOLOGIE FARMACEUTICHE, TOSSICOLOGICHE E NUTRACEUTICO-ALIMENTARI, 03/D1 (conseguita il 31/03/2017)

-FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI, 03/B1 (conseguita il 12/04/2017).

-CHIMICA E TECNOLOGIE FARMACEUTICHE, TOSSICOLOGICHE E NUTRACEUTICO-ALIMENTARI, 03/D1 (conseguita il 31/03/2017)*

-BIOCHIMICA GENERALE, 05/E1 (conseguita il 31/03/2017)

- 05/12/2017 Abilitazione Scientifica Nazionale come professore di II fascia per i settori concorsuali:

-MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE, 03/A2 (conseguita il 5/12/2017).

Corsi e Scuole frequentati

- 2006: School "Mass spectrometry and HPLC of proteins" Firenze. 1 – 11 May 2006.
- 2006: Summer School in computational chemistry Siena 25-29 September 2006.
- 2006: Summer School "COMPUTATIONAL APPROACHES IN DRUG DESIGN " University of Bologna. 23-25 October 2006
- 2007: Winter School on Physical Organic Chemistry, Bressanone. 11-18 January 2007
- 2007: VI European Workshop in Drug Design, Siena, June, 3-10, 2007.
- 2008: Winter School on Physical Organic Chemistry, Bressanone. 27 January – 1 February 2008.
- 2009 :31 August-5 September 2009, Summer School: "Summer School on Simulation Approaches to Problems in Molecular and Cellular Biology", San Sebastian (Spain).
- 2010: Winter School on Physical Organic Chemistry, Bressanone. 31 January-5 February 2010.
- 2011: CP2K Tutorial February 7, 2011 - February 11, 2011, ETH Zurich.
- 2015: X European Workshop in Drug Design, Siena 17-22.
- 2018 Intensive training (only two students) about the use of Microscale Thermophoresis (MST) c/o Nanotemper Technologies 1-2 February 2018, Munich (Germany).

Attività di ricerca:

- Gennaio 2006-Dicembre 2008 Dottorato di ricerca presso il dipartimento di scienze farmaceutiche dell'università di Firenze.

Argomenti: Messa a punto di un protocollo computazionale per il calcolo dell'affinità fra piccole molecole organiche ed il recettore nicotinico $\alpha 4\beta 2$. Calcolo dell'affinità fra inibitori ed enzimi ad attività glicosidica mediante metodi avanzati per il calcolo dell'energia libera (parte svolta in collaborazione con il prof. Paolo Carloni sotto la cui supervisione ho lavorato da giugno 2007 a gennaio 2008 presso la Scuola Superiore di Studi Avanzati (SISSA) di Trieste).

- Marzo 2009-Settembre 2010, Assegnista presso il Dipartimento di Chimica dell'università di Firenze e CERM (responsabile della ricerca prof. R. Pierattelli).

Argomenti: Messa a punto di un protocollo computazionale per la modellazione strutturale di metalloproteine utilizzando NMR chemical shift. Studi strutturali su complessi fra metallo beta-lattamasi ed inibitori noti.

- Ottobre 2010-Settembre 2012, Assegnista di Ricerca presso IOM-CNR c/o SISSA, Trieste (responsabile della ricerca Dr. A. Magistrato).

Argomenti: Studi funzionali e sulla reattività dell'enzima aromatasi umana. Studi di reattività su ribozimi. Studi sul funzionamento di cotrasportatori sodio/galattosio. Studi sull'interazione fra proteine e nanotubi.

- Ottobre 2012-Settembre 2014, Assegnista di Ricerca presso ICRM-CNR Milano (responsabile della ricerca prof. G. Colombo).

Argomenti: Studi sul funzionamento della proteina HSP90. Studi di reattività e drug design su serina beta-lattamasi. Studi sulla regolazione allosterica dell'aromatasi umana.

- Da Ottobre 2014 ad Oggi: Ricercatore presso l'Istituto di Ricerca in Biomedicina (IRB), Università della Svizzera Italiana, Bellinzona (CH) (Gruppo Dr. A. Cavalli). Il gruppo è anche parte dell'Istituto Svizzero di Bioinformatica (SIB).

Argomenti: Studi funzionali, di drug design sulle proteine: STAT3, piruvato deidrogenasi, HMGB1 ed ERG mediante metodologie teoriche e sperimentali. Studi funzionali sull'aromatasi umana

Tutoraggi, Attività didattica e Attività di servizio

Tutta la mia attività didattica e, in particolare gli incarichi come docente a contratto, è stata inquadrata nel settore **Chim/08**.

- AA 2006/2007 attività di tutoraggio all'interno del modulo professionalizzante: "attività regolatorie nel settore industriale farmaceutico" organizzato da regione Toscana e facoltà di Farmacia dell'Università di Firenze (300 ore).
- AA 2006/2007 Attività didattica (4 ore di lezione frontale) all'interno del corso Modellistica Molecolare, per il corso di laurea specialistica in Biotecnologie Farmaceutiche, presso la Facoltà di Farmacia dell'università di Firenze.

- AA 2008/2009: Attività didattica all'interno del corso Modellistica Molecolare (8 ore di lezione frontale), per il corso di laurea specialistica in Biotecnologie Farmaceutiche, presso la Facoltà di Farmacia dell' università di Firenze.
- Correlatore di due tesi di laurea magistrale Chimica e tecnologia Farmaceutiche (Beatrice Novati, Discussa il 12/03/2014) e Farmacia (Jessica Andriolo, Discussa il 18/05/2018) e di una tesi di laurea in Scienze e tecnologie Erboristiche (Giulia Benigno, discussa il 21/03/2019) presso l'università degli studi di Milano.
- Membro della commissione di tesi per la tesi di laurea in Chimica e tecnologie farmaceutiche discussa da Enrico Fassi il presso l'Università degli studi di Milano il 15/05/2017.
- Collaborazione con la Dr. Alessandra Magistrato (IOM c/o SISSA, Trieste) nella supervisione di tre studenti di dottorato (Duvan Franco, Ina Bisha e Federica De Leo) e uno di laurea magistrale (Marta Bon). In tutti i casi la collaborazione è dimostrata da pubblicazioni congiunte con gli studenti seguiti.
- AA 2016/2017 professore a contratto presso l'Università degli Studi di Milano per il corso "Methods of analysis applied to water, air, biological fluids, tissues, food and In Silico Methods in Toxicology" (5 CFU, **40 ore di lezione teorica, SSD Chim/08**). **Corso tenuto totalmente in lingua inglese** per il corso di laurea in "SAFETY ASSESSMENT OF XENOBIOTICS AND BIOTECHNOLOGICAL PRODUCTS (Classe LM-9)" e membro della commissione di esame.
- AA 2017/2018 professore a contratto presso l'Università degli Studi di Milano per il corso "LABORATORIO DI ANALISI QUANTITATIVA", corso di Laurea in Farmacia (**2 CFU, 32 ore di esercitazioni pratiche di laboratorio, SSD chim/08**) e membro della commissione di esame.
- AA 2018/2019 professore a contratto presso l'Università degli Studi di Milano per il corso "LABORATORIO DI ANALISI DEI MEDICINALI", corso di Laurea in Chimica e tecnologie farmaceutiche (**3 CFU, 48 ore di esercitazioni pratiche di laboratorio, SSD chim/08**) membro della commissione di esame.
- AA 2019/2020 professore a contratto presso l'Università degli Studi di Milano per il corso "Analisi avanzata dei principi attivi delle droghe vegetali", corso di Laurea in Scienze e tecnologie erboristiche (**2 CFU, 32 ore di esercitazioni pratiche di laboratorio, SSD chim/08**).
- 2020: Esaminatore esterno per la tesi di dottorato intitolata "Mechanistic modelling of HIV-1 protease and its natural substrates: a theoretical perspective". Candidato Ms Zainab Kemi Sanusi, Supervisors: Dr Glenn Maguire and Prof Gert Kruger. University of KwaZulu-Natal (South Africa).
- Attività di servizio:
 - membro della **Commissione per l'indagine delle proposte di Lauree magistrali** nate in relazione CdS di STE sul territorio nazionale presso il dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'università degli studi di Milano.

-responsabile comunicazione del corso di laurea STE presso il dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'università degli studi di Milano.

Progetti di calcolo ottenuti mediante procedura competitiva e valutazione peer-review.

ANNO	TITOLO	
2010	Pi per il progetto: Molecular recognition mechanism of dna damages investigated via molecular simulations: the prototypical case of uracil dna glycosylase	COMPUTING PROJECT AT THE ITALIAN HPC CENTER-CINECA (119 000 ORE/CORE)
2012	Pi per il progetto: Reactivity of human flap endonuclease 1 (hfen-1) investigated by classical md and qm/mm meta-dynamics	COMPUTING PROJECT AT THE ITALIAN HPC CENTER-CINECA (900 000 ORE/CORE)
2013	Pi per il progetto: Preparatory prace access grant for testing scalability of qm/mm codes to study beta-lactamase reactivity.	PARTNERSHIP FOR ADVANCED COMPUTING IN EUROPE (PRACE).
2014	Pi per il progetto: Investigating hsp90 conformational modulation by computer simulations.	INTERDISCIPLINARY LABORATORY FOR ADVANCED SIMULATION (PROGETTI DI CALCOLO FINANZIATI DA REGIONE LOMBARDIA). (50 000 ore/core)

Partecipazione a progetti scientifici e di calcolo

2013: Co-Pi (PI Giorgio Colombo) per il progetto: Investigating conformational transitions of hsp90 by bias-exchange meta-dynamics PARTNERSHIP FOR ADVANCED COMPUTING IN EUROPE (PRACE) (20.000.000 ore/core).

Ho partecipato come collaboratore alla redazione e realizzazione di 16 progetti supportati dal Cineca con ore di calcolo all'interno del programma ISCRA e a 3 progetti supportati dal CSCS (centro svizzero di calcolo ad alte prestazioni).

Membro dell'unità di ricerca per il progetto (KLS 3839-02-2016) intitolato: Structural basis for the inhibition of STAT3 transcription factor by small molecules. Finanziato con 245450 CHF dalla lega svizzera contro il cancro (PI Dr. Andrea Cavalli).

Responsabilita' di studi e ricerche scientifiche affidati da istituzioni pubbliche o private:

Gennaio 2019: Incarico conferito da parte della ditta MGGM LLC, Bleecker St., New York, USA, per effettuare studi molecular modeling sull'interazione fra recettori NMDA e piccole molecole organiche. L'incarico è stato rinnovato a Marzo 2020.

Richieste di Finanziamento

Maggio 2015: Borse ICARE (Airc), Titolo del progetto 'From structure to new anticancer therapies targeting STAT3. Valutazione positiva, collocato in lista di riserva.

Settembre 2015: Borse Marie Curie, Titolo del progetto 'Understanding molecular determinants of Light Chain Amyloidosis by high-throughput computer simulations'. Valutazione positiva, collocato in lista di riserva.

Programma SIR: Titolo del progetto 'Functional mechanism of muscarinic receptors explored by computer simulations', Valutazione: Livello B, proposta di Buona qualità ma non idonea a passare alla seconda fase di valutazione.

Abilità tecniche

- Ottima conoscenza sistemi Linux, MacOS e Windows.
- Ottima conoscenza Word, Excell, Power Point, Keynote.
- Software applicativi per il molecular modeling e simulazioni molecolari (Prime, Phase, Glide, Jaguar, MarcoModel, QSITE), MOE, Gaussian09, Gromacs, Amber, Autodock 4.0, VMD, Rosetta and CS-Rosetta, NAMD, CP2K, Modeller, PLUMED, pymol).
- Bash Shell scripting
- Gestione siti web.
- Microscale thermophoresis, SPR, DSF.

Conoscenze Linguistiche

Ottima conoscenza della lingua inglese.

Attività editoriale ed altre esperienze

- Topic editor of *Molecules* (edita da MDPI) e guest editor per una special issue intitolata 'Integration between Computational and Experimental Biophysical Techniques in the Study of Biologically Relevant Systems' sulla stessa rivista.
- Membro dell'editorial board della rivista *Scientific Reports*, sezione Chemical Biology.
- Membro dell'editorial board della rivista "Bioinorganic Chemistry and Applications" edita da Hindawi.
- Attività di referaggio per *Plos One* e *Journal of computer aided molecular design*, *Journal of Chemical Physics*, *Chemical Physics Letters*, *RSC Advance*, *CINECA*, *Journal of chemical information and modeling*, *European Journal of Medicinal Chemistry*, *Bioorganic and medicinal chemistry letters*, *Molecules* etc. Una lista complete delle review effettuate negli ultimi anni e' disponibile nel mio profilo publons: <https://publons.com/author/1338877/jacopo-sgrignani#profile> .
- Seminari su invito presso: Università di Bologna, Università di Roma "La Sapienza", Istituto Italiano di tecnologia, Istituto di ricerca in Biomedicina (IRB), Università di Brescia.
- Membro dello staff del XXII congresso della Società Chimica Italiana tenuto a Firenze dal 10 al 15 settembre 2006.
- Membro dello staff del 'Joint EUROMAR 2010 e 17th ISMAR Conference' tenuto a Firenze dal 4 al 9 luglio 2010.

Partecipazione a società scientifiche

Socio delle seguenti società scientifiche: Società chimica Italiana (divisione di Chimica Farmaceutica e di Chimica dei sistemi Biologici); QSAR, CHEMOINFORMATICS AND MODELING SOCIETY; LIFE SCIENCE SWITZERLAND.

Richieste di brevetto depositate

Inventors: Andrea Cavalli, Jacopo Sgrignani, Mariagrazia Ugucconi. Deposit date: 21 March 2019; PCT application number: PCT/EP2019/057125; title: PEPTIDE INHIBITORS TARGETING THE CXCL12/HMGB1 INTERACTION AND USES THEREOF

Inventors: Paolo L. Manfredi, Charles E. Inturrisi, Andrea Mattarei, Jacopo Sgrignani, Sara De Martin, Andrea Cavalli. Deposit date: 30 Januray 2019, Application Number: US 62/798, 709. Title: Structurally Modified Opioids for Prevention and Treatment of Diseases.

1. Emanuele Bassini, Stefano Gazzotti, Filomena Sannio, Leonardo Lo Presti, Jacopo Sgrignani, Jean-Denis Docquier, Giovanni Grazioso, Alessandra Silvani. **Isonitrile-based Multicomponent Synthesis of β -Amino Boronic Acids as β -lactamase Inhibitors**. Antibiotics, 2020, Accepted. (IF₂₀₁₈ 2.92)
2. Mariangela Garofalo, Giovanni Grazioso, Andrea Cavalli and Jacopo Sgrignani. **How Computational Chemistry and Drug Delivery Techniques Can Support the Development of New Anticancer Drugs**. Molecules 2020, 25(7), 1756. (IF₂₀₁₈ 3.060)
3. Alessandro Marazza, Carmela Galli, Elisa Fasana, Jacopo Sgrignani, Patricie Burda, Enrico M. A. Fassi, Mathias Baumgartner, Andrea Cavalli, Maurizio Molinari. **Endoplasmic Reticulum and Lysosomal Quality Control of Four Nonsense Mutants of Iduronate 2-Sulfatase Linked to Hunter's Syndrome**, DNA Cell Biol 2020, 39, 226-234. (IF₂₀₁₈ 2.91)
4. Lisa Moni, Luca Banfi, Daniele Cartagena, Andrea Cavalli, Chiara Lambruschini, Elisa Martino, Romano V. A. Orru, Eelco Ruijter, Jordy M. Saya, Jacopo Sgrignani and Renata Riva. **Zinc(ii)-mediated diastereoselective Passerini reactions of biocatalytically desymmetrised renewable inputs**, Org. Chem. Front., 2020,7, 380-398. (IF₂₀₁₈ 5.07)
5. Enrico M. A. Fassi,* Jacopo Sgrignani,* Gianluca D'Agostino, Valentina Cecchinato, Maura Garofalo, Giovanni Grazioso, Mariagrazia Uguccioni, Andrea Cavalli. **Oxidation state dependent conformational changes of HMGB1 regulate the formation of the CXCL12/HMGB1 heterocomplex**. Comput. Struct. Biotechnol. J. 2019, 17, 886-894. *These two authors equally contributed to the work. (IF₂₀₁₈ 4.72)
6. Carmen Lammi, Jacopo Sgrignani, Anna Arnoldi, Giordano Lesma, Claudia Spatti, Alessandra Silvani, Giovanni Grazioso. **Computationally Driven Structure Optimization, Synthesis, and Biological Evaluation of Imidazole-based Proprotein Convertase Subtilisin/Kexin-9 (PCSK9) Inhibitors**. J. Med. Chem, 2019, 6163-6174. DOI: 10.1021/jm0604880. (IF₂₀₁₈ 6.05)
7. Angelo Spinello; Silvia Martini; Federico Berti; Marzia Pennati; Matic Pavlin; Jacopo Sgrignani; Giovanni Grazioso; Giorgio Colombo; Nadia Zaffaroni; Alessandra Magistrato. **Rational design of allosteric modulators of the aromatase enzyme: An unprecedented therapeutic strategy to fight breast cancer**. Eur J Med Chem. 2019, 168, 253-262. (IF₂₀₁₈ 4.83).
8. Jacopo Sgrignani, Lorenzo Casalino, Fabio Doro, Angelo Spinello e Alessandra Magistrato. **Can Multi-Scale Simulations Unravel the Function of Metallo-Enzymes to Improve Knowledge-based Drug Discovery?** Future Med. Chem. 2019, 11, Issue 7. (IF₂₀₁₈ 3.97).
9. Carmen Lammi, Jacopo Sgrignani, Gabriella Roda, Anna Arnoldi, and Giovanni Grazioso. **Inhibition of PCSK9D374Y/LDLR Protein-Protein Interaction by Computationally Designed T9 Lupin Peptide**. ACS Med Chem Lett. 2019, 10, 425-430.

10. Carmen Lammi, Jacopo Sgrignani, Anna Arnoldi, Giovanni Grazioso. Biological Characterization of Computationally Designed Analogs of peptide TVFTSWEEYLDWV (Pep2-8) with Increased PCSK9 Antagonistic Activity. 2019, Sci. Rep, 9, 2643. (IF₂₀₁₈ 4.01)
11. Jacopo Sgrignani*, JingJing Chen, Andrea Alimonti and Andrea Cavalli.* **How phosphorylation influences E1 subunit pyruvate dehydrogenase: A computational study.** 2018, Sci. Rep., 8, 14683. *Corresponding author (IF₂₀₁₈ 4.01)
12. Giovanni Grazioso, Carlotta Bollati, Jacopo Sgrignani, Anna Arnoldi, Carmen Lammi. **First Food-Derived Peptide Inhibitor of the Protein–Protein Interaction between Gain-of-Function PCSK9D374Y and the Low-Density Lipoprotein Receptor.** 2018, J. Agric. Food Chem., 66, 10552–10557. (IF₂₀₁₈ 3.57)
13. Jacopo Sgrignani, Maura Garofalo, Milos Matkovic, Jessica Merulla, Carlo V. Catapano, Andrea Cavalli. Structural Biology of STAT3 and Its Implications for Anticancer Therapies Development. Int. J. Mol. Sci. 2018, 19(6), 1591. (IF₂₀₁₈ 4.18)
14. Jingjing Chen, Ilaria Guccini, Diletta Di Mitri, Daniela Brina, Ajinkya Revandkar, Emiliano Pasquini, Abdullah Alajati, Sandra Pinton, Gianluca Civenni, Carlo Catapano, Jacopo Sgrignani, Andrea Cavalli, Rocco D'Antuono, John M. Asara, Andrea Morandi, Paola Chiarugi, Ionica Masgras, Andrea Rasola, Ramon Garcia-Escudero, Nicolas Delaleu, Andrea Rinaldi, Francesco Bertoni, Arkaitz Carracedo & Andrea Alimonti. **Compartmentalized activities of the pyruvate dehydrogenase complex sustain lipogenesis in prostate cancer.** 2018, Nature Gen. 50, 219-228, doi:10.1038/s41588-017-0026-3. (IF₂₀₁₇ 27.12)
15. Alessandra Magistrato*, Jacopo Sgrignani*, Rolf Krause, Andrea Cavalli. **Single or Multiple Access Channels to the CYP450s Active Site? An Answer from Free Energy Simulations of the Human Aromatase Enzyme.** J. Phys. Chem. Lett., 2017, 8 (9), pp 2036–2042. *These two author equally contributed to the work. (IF₂₀₁₈ 7.3)
16. Jacopo Sgrignani, Filomena De Luca, Hayarpi Torosyan, Jean-Denis Docquier, Da Duan, Beatrice Novati, Fabio Prati, Giorgio Colombo, Giovanni Grazioso. **Structure-based approach for identification of novel phenylboronic acids as serine-β-lactamase inhibitors.** J. Comp. Aided Drug Des. 2016, 30:851-861. (IF₂₀₁₈ 3.25)
17. Jacopo Sgrignani, Giovanni Grazioso and Marco De Amici. **Insight into the Mechanism of Hydrolysis of Meropenem by OXA-23 Serine-β-lactamase Gained by Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Calculations.** Biochemistry 2016, 55, 5191-200. (IF₂₀₁₈ 2.95)
18. Giovanni Grazioso, Jacopo Sgrignani, Romina Capelli, Carlo Matera, Clelia Dallanoce, Marco De Amici, Andrea Cavalli. **Allosteric Modulation of Alpha7 Nicotinic Receptors: Mechanistic Insight through Metadynamics and Essential Dynamics.** J. Chem. Inf. Mod. 2015, 55, 2528-39. (IF₂₀₁₈ 3.96)

19. Jacopo Sgrignani, Marcella Iannuzzi, Alessandra Magistrato. **Role of Water in The Puzzling Mechanism of Final Aromatization Step Promoted by the Human Aromatase Enzyme. Insights from QM/MM MD Simulations.** J. Chem. Inf. Mod. 2015, 55, 2218-2. (IF₂₀₁₈ 3.95)
20. Jacopo Sgrignani, Simon Olsson, Dariusz Ekonomiuk, Davide Genini, Rolf Krause, Carlo V. Catapano, Andrea Cavalli. **Molecular determinants for unphosphorylated STAT3 dimerization by integrative modelling.** Biochemistry, 2015, 54, 5489-501. (IF₂₀₁₇ 2.95)
21. Jacopo Sgrignani, Andrea Cavalli, Giorgio Colombo, Alessandra Magistrato. **Enzymatic and Inhibition Mechanism of Human Aromatase (CYP19A1) Enzyme. A computational perspective from QM/MM and classical molecular dynamics simulations.** Mini Rev.Med. Chem., 2016;16(14):1112-24. . (IF₂₀₁₈ 2.84)
22. Jacopo Sgrignani* and Alessandra Magistrato. **QM/MM MD simulations on the enzymatic pathway of the human flap endonuclease (hFEN1) elucidate common cleavage pathways to RNase H enzymes.** 2015, ACS Catalysis, 2015, 5, 3864–3875. *Corresponding author . (IF₂₀₁₈ 12.22)
23. Simon Olsson, Dariusz Ekonomiuk, Jacopo Sgrignani, Andrea Cavalli. **Molecular dynamics of biomolecules through direct analysis of dipolar couplings.** 2015, J. Am. Chem. Soc., 2015, 137, 6270–6278. . (IF₂₀₁₈ 14.69)
24. Jacopo Sgrignani, Beatrice Novati, Giorgio Colombo, Giovanni Grazioso. **Covalent docking of selected boron-based serine beta-lactamase inhibitors.** J. Comput. Aided Mol. Des., 2015, 29, 441-50. (IF₂₀₁₈ 3.25)
25. Jacopo Sgrignani, Marta Bon, Giorgio Colombo, Alessandra Magistrato. **Computational Approaches Elucidate the Allosteric Mechanism of Human Aromatase Inhibition: A Novel Possible Route to Small-Molecule Regulation of CYP450s Activities?** J Chem Inf Model., 2014, 54, 2856–2868. (IF₂₀₁₈ 3.95)
26. Jacopo Sgrignani, Giovanni Grazioso, Marco De Amici, Giorgio Colombo. **Inactivation of TEM-1 by avibactam (NXL-104): insights from quantum mechanics/molecular mechanics metadynamics simulations.** Biochemistry 2014, 53, 5174-85. (IF₂₀₁₈ 2.95)
27. Federica De Leo, Jacopo Sgrignani, Davide Bonifazi, Alessandra Magistrato. **Structural and Dynamic Properties of Monoclonal Antibodies Immobilized on CNTs: A Computational Study.** Chemistry, 2013, 19(37), 12281-93. (IF₂₀₁₈ 5.16)
28. Duvan Franco, Jacopo Sgrignani, Giovanni Bussi, Alessandra Magistrato. **Structural Role of Uracil DNA Glycosylase for the Recognition of Uracil in DNA Duplexes. Clues from Atomistic Simulations.** J Chem Inf Model., 2013, 53 (6), 1371-1387. (IF₂₀₁₈ 3.95)

29. Riccardo Marega, Federica De Leo, Florent Pineux, Jacopo Sgrignani, Alessandra Magistrato, Anil D. Naik, Yann Garcia, Lionel Flamant, Carine Michiels and Davide Bonifazi. **Functionalized Fe-filled MWCNTs as Multifunctional Scaffolds for Magnetization of Cancer Cells.** *Adv Funct Mat.*, 2013, 23, 3173–3184. (IF₂₀₁₈ 13.32)
30. Ina Bisha, Alessandro Laio, Alessandra Magistrato, Alejandro Giorgetti, and Jacopo Sgrignani.^{*} **A Candidate Ion-Retaining State in the Inward-Facing Conformation of Sodium/Galactose Symporter: Clues from Atomistic Simulations.** *J. Chem. Theory Comput.*, 2013, 9, 1240–1246.
^{*}Corresponding author (IF₂₀₁₇ 5.31)
31. Jacopo Sgrignani and Alessandra Magistrato. **First Principles Modeling of Biological Systems and Structure-Based Drug-Design.** *Curr Comput Aided Drug Des.* 2013, 1, 15-34. (IF₂₀₁₈ 1.2)
32. Jacopo Sgrignani, Alessandra Magistrato. **Influence of the membrane lipophilic environment on the structure and on the substrate access/egress routes of the human aromatase enzyme. A computational study.** *J Chem Inf Model.*, 2012, 25 :1595-606. (IF₂₀₁₈ 3.95)
33. Jacopo Sgrignani, Alessandra Magistrato, Matteo Dal Peraro, Paolo Carloni, A, Alejandro J. Vila, Roberta Pierattelli. **On the active site of mononuclear B1 metallo β -lactamases: a computational study.** *J Comput Aided Mol Des.*, 2012, 26: 425-35. (IF₂₀₁₈ 3.25)
34. Jacopo Sgrignani and Alessandra Magistrato: **The structural role of Mg²⁺ ions in a class I RNA polymerase ribozyme. A molecular Simulation Study.** *J. Phys. Chem. B.*, 2012, 116, 2259–2268. (IF₂₀₁₈ 2.92)
35. Jacopo Sgrignani and Roberta Pierattelli. **Nuclear magnetic resonance signal chemical shifts and molecular simulations: a multidisciplinary approach to modeling copper protein structures.** *J. Biol. Inorg. Chem.*, 2012. 17 :71-79. (IF₂₀₁₈ 3.63)
36. Jacopo Sgrignani, Duvan Franco and Alessandra Magistrato. **Theoretical Studies of Homogeneous Catalysts Mimicking Nitrogenase,** *Molecules*, 2011, 16, 442-465. (IF₂₀₁₈ 3.06)
37. Jacopo Sgrignani, Claudia Bonaccini, Giovanni Grazioso, Matteo Chioccioli, Andrea Cavalli and Paola Gratterer. **Insights into docking and scoring neuronal $\alpha 4\beta 2$ nicotinic receptor agonists using Molecular Dynamics simulations and QM/MM calculations.** *J.Comp. Chem.*, 2009, 30, 2443–2454. (IF₂₀₁₈ 3.19)
38. Daniela Catarzi, Vittoria Colotta, Flavia Varano, Guido Filacchioni, Paola Gratterer, Jacopo Sgrignani, Alessandro Galli, and Chiara Costagli. **Synthesis and Biological Evaluation of Novel 9-Heteroaryl Substituted 7-Chloro-4,5-dihydro-4-oxo-1,2,4-triazolo[1,5-a]quinoxaline-2-carboxylates (TOX) as AMPA Receptor Antagonists.** *Chem. Pharm. Bull.*, 2008, 56,1085-91. (IF₂₀₁₈ 1.40)

39. Carla Bazzicalupi, Andrea Bencini, Claudia Bonaccini, Claudia Giorgi, Paola Gratteri, Stefano Moro, Manlio Palumbo, Alessandro Simionato, **Jacopo Sgrignani**, Claudia Sissi, Barbara Valtancoli. **Tuning the activity of Zn(II) complexes in DNA cleavage. Clues for design of new efficient metallo-hydrolases.** *Inorg. Chem.*, 2008, 47, 5473-5484. (IF₂₀₁₈ 4.85)
40. Vittoria Colotta, Daniela Catarzi, Flavia Varano, Ombretta Lenzi, Guido Filacchioni, Chiara Costagli, Alessandro Galli, Carla Ghelardini, Nicoletta Galeotti, Paola Gratteri, **Jacopo Sgrignani**, Francesca Deflorian, and Stefano Moro. **Structural Investigation of the 7-Chloro-3-hydroxy-1H-quinazoline-2,4-dione Scaffold to Obtain AMPA and Kainate Receptor Selective Antagonists. Synthesis, Pharmacological, and Molecular Modeling Studies.** *J. Med. Chem.* 2006 49, 6015-26. (IF₂₀₁₈ 6.05)

Copertine

Quattro pubblicazioni sono state selezionate come cover per *Advanced Functional Materials*, *Chemistry* and *Journal of chemical information and modelling*.



Atti di conferenze

-Bisha, Ina; Rodriguez, Alex; Sgrignani Jacopo; Magistrato Alessandra; Laio Alessandro.
58th Annual Meeting of the Biophysical-Society Location: San Francisco, CA Date: FEB 15-19, 2014. **Sodium-Galactose Transporter: The First Steps of the Transport Mechanism Investigated by Molecular Dynamics.**

BIOPHYSICAL JOURNAL Volume: 106 Issue: 2 Supplement: 1

-De Leo, Federica; Sgrignani Jacopo; Magistrato, Alessandra; Bonifazi Davide.
Conference: 58th Annual Meeting of the Biophysical-Society Location: San Francisco, CA Date: FEB 15-19, 2014. **Sodium-Galactose Transporter: first steps of transport mechanism investigated by molecular dynamics**

BIOPHYSICAL JOURNAL Volume: 106 Issue: 2 Supplement: 1

-Bisha Ina.; Laio Alessandro; Magistrato Alessandra; Giorgetti Alejandro and Sgrignani Jacopo.
Conference: 9th European-Biophysical-Societies-Association Congress Location: Lisbon, PORTUGAL Date: JUL 13-17, 2013. **Sodium-Galactose Transporter: first steps of transport mechanism investigated by molecular dynamics.**

EUROPEAN BIOPHYSICS JOURNAL WITH BIOPHYSICS LETTERS Volume: 42 Supplement: 1
Pages: S78-S78

-Marita Zoma, Dheeraj Shinde, Domenico Albino, Simone Mosole, **Jacopo Sgrignani**, Andrea Cavalli, Carlo V. Catapano, Giuseppina M. Carbone. ERG lysine methylation promotes prostate cancer progression in ERG transgenic mice. In: Proceedings of the American Association for Cancer Research Annual Meeting 2018; 2018 Apr 14-18; Chicago, IL. Philadelphia (PA): AACR; Cancer Res 2018;78 (13 Suppl).

Comunicazioni a congressi e workshop

Presentazioni orali

-**"Free energy calculation to evaluate glycosidase inhibitors"** Winter School on Physical Organic Chemistry (WISPOC), Bressanone, (Italy), 27/01 -1/02 2008.

-**"Human aromatase structure and function investigated by classical and QM/MM simulations"** congresso annuale della divisione di chimica dei sistemi biologici della societa' chimica italiana Napoli, 24-25/09/2012

- **"Large scale simulations of Hsp90"** meeting annuale del progetto INTEROMICS, Roma, 4-5/06/2013.

-**"Human aromatase ligand recognition and allosteric regulation investigated by computational methods"** 3Th Computational Driven Drug Discovery meeting, Verona, 4-6 Marzo 2014.

-**Invited speaker** al CECAM workshop intitolato: **"Structural and Functional Annotation of Bioinorganic Systems: Perspectives and Challenges from Theory and Experiments"** Pisa (Italy) 23-25 Maggio 2016. Presentazione intitolata **'Human Aromatase: From the Functional Mechanism to New Therapeutic Strategies'**.

-**"Computational modelling of pyruvate dehydrogenase functional mechanism and inhibitors design"** 5Th Computational Driven Drug Discovery, Milano, 16-17/11/2017.

-**"How the oxidation state regulates the CXCL12/HMGB1 heterocomplex"**, MD2dmeeting2019, Bologna 14-15th Marzo, 2019.

-**"A new CXCL12/HMGB1 heterocomplex inhibitor"** XXVI meeting in Medicinal Chemistry, Milano, 16-19 Luglio, 2019.

-**"HMGB1: Structural modeling and drug design"** Convegno nazionale della Divisione di Chimica dei sistemi biologici, Siena 11-13 Settembre 2019.

-**"HMGB1 a small but complex protein "** New Approaches in Molecular Modeling Workshop, Università degli Studi di Milano, 13 Settembre 2019.

Presentazioni poster:

-J. Sgrignani, C. Bonaccini, F. Melani, D. Catarzi, P. Gratteri. **"Docking and 3D-QSAR analysis on i-GluR2 receptor"**, page 188 Far-P-069, Libro degli Abstract, XXII Congresso della Società chimica italiana, Firenze 10-15 Settembre 2006..

-Bazzicalupi C., Gratteri P., Moro S., Sissi C., Bencini A., Sgrignani J., Melani F., Palombo M., Richter S., Giorgi C., Valtancoli B. **"Experimental and Theoretical Study of the Nuclease Activity of Mono- and Binuclear Zinc Complexes"** page 187 Far-O-068, Libro degli Abstract, XXII Congresso della Società chimica italiana, Firenze 10-15 Settembre 2006.

-C. Bonaccini, J.Sgrignani, P.Gratteri. **"Molecular modelling studies on $\alpha 4\beta 2$ nicotinic receptor ligands"** page 163 Far-IL-07, Libro degli Abstract, XXII Congresso della Società chimica italiana, Firenze 10-15 Settembre 2006.

-Jacopo Sgrignani, Claudia Bonaccini, Matteo Chioccioli, Francesca Cardona, Andrea Goti and Paola Gratteri. **"Molecular modeling investigations of ligands acting as glucoamylase II inhibitors"** Winter School on Physical Organic Chemistry, Bressanone 11-18 gennaio 2007.

-Jacopo Sgrignani, Claudia Bonaccini, Matteo Chioccioli, Francesca Cardona, Andrea Goti, Giovanni Grazioso and Paola Gratteri. **"Molecular modeling investigations of ligands acting as glucoamylase II inhibitors"**, VI European Workshop in Drug Design, Siena, giugno, 3-10, 2007.

-C. Bonaccini, J. Sgrignani, C. Guarino, S. Selleri, P. Gratteri. **"Induced-fit docking investigation on a subtype selective binding mode for bicyclic GABAA Bz receptor ligands bearing pyrazole nucleus"** ACS-EFMC "Frontiers in CNS and Oncology Medicinal Chemistry", Siena, 7-9 Ottobre 2007 (Poster communication P76, p.49 Book of Abstract).

-Jacopo Sgrignani, Simone Raugei, Claudia Bonaccini, Matteo Chioccioli, Paolo Carloni, Paola Gratteri. **"Free energy calculation to evaluate glycosidase inhibitors"**. Winter School on Physical Organic Chemistry, Bressanone. 27 Gennaio – 1 Febbraio 2008. Book of abstracts, poster 29

-Claudia Bonaccini, Jacopo Sgrignani, Matteo Chioccioli, Giovanni Grazioso, Andrea Cavalli, Paola Gratteri. **Insights into docking and scoring neuronal $\alpha 4\beta 2$ nicotinic receptor agonists using Molecular Dynamics simulations and QM/MM calculations.** III NPCF Meeting, 13-14 Febbraio 2009.

-Matteo Chioccioli, Claudia Bonaccini, Jacopo Sgrignani, Simone Marsili, Piero Procacci, Paola Gratteri. **REM (Replica Exchange Method) investigation on conformational flexibility of KDR.** III meeting NPCF. 13-14 Febbraio 2009.

-Jacopo Sgrignani, Roberta Pierattelli. **NMR chemical shifts and molecular simulations: a multidisciplinary approach to study metalloproteins.** Summer School: "Summer School on

Simulation Approaches to Problems in Molecular and Cellular Biology", San Sebastian (Spain). 31 Agosto-5 Settembre 2009.

-*Jacopo Sgrignani, Roberta Pierattelli. Metalloprotein structure from NMR chemical shifts.* Winter School on Physical Organic Chemistry, Bressanone. 31 gennaio-5 febbraio 2010.

-*Jacopo Sgrignani, Alessandra Magistrato. Structure and function of human aromatase investigated by molecular simulations.* V meeting NPCF, 28-30 marzo 2011, Trieste.

-*Jacopo Sgrignani, Alessandra Magistrato. Structure and function of human aromatase investigated by classical and QM/MM molecular dynamic simulations.* Irene conference, Trieste, 8-9 Maggio 2012.

-*Ina Bisha, Jacopo Sgrignani, Alejandro Giorgietti, Alessandro Laio and Alessandra Magistrato. Sodium Sodium-Galactose Transporter: the first steps of the transport mechanism investigated by molecular dynamics.* Molecular Simulations of Membrane Proteins: From Biophysics to Pharmacological Applications Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland 7-9 marzo, 2012.

-*Ina Bisha., Jacopo Sgrignani, Alex Rodriguez., Alejandro Giorgetti., Alessandra Magistrato, Alessandro Laio. Sodium-Galactose Transporter: the first steps of the transport mechanism investigated by molecular dynamics.* BioMedical Transporters 2013 – agosto 11-15, St. Moritz, Switzerland.

-*Ina Bisha., Jacopo Sgrignani, Alex Rodriguez., Alejandro Giorgetti., Alessandra Magistrato, Alessandro Laio. Sodium-Galactose Transporter: the first steps of the transport mechanism investigated by molecular dynamics.* Lisbon: 9th European Biophysics Congress 2013, Luglio 13-17, Lisbon, Portugal. EBSA2013.

-*Federica De Leo, Jacopo Sgrignani, Alessandra Magistrato, Davide Bonifazi Structural and Dynamical Properties of Monoclonal Antibodies Immobilized on CNTs: A Computational Study.* Biophysical Journal 106(2) pp. 620a 0. Presented in 58th meeting of biophysical society, San Francisco, 15-19 Febbraio 2014.

-*Ina Bisha, Alex Rodriguez, Jacopo Sgrignani, Alessandra Magistrato, Alessandro Laio. Sodium-Galactose Transporter: The First Steps of the Transport Mechanism Investigated by Molecular Dynamics.* Biophysical Journal 106(2) pp. 365a - 366a. Presented in 58th meeting of biophysical society, San Francisco, 15-19 Febbraio 2014.

-*Jacopo Sgrignani, Davide Genini, Carlo V. Catapano, Andrea Cavalli. Structure and dynamics of unphosphorylated STAT3 (USTAT3) dimers investigated by computer simulations.* X European Workshop in Drug Design, Siena 17-22 Maggio 2015.

-*Jacopo Sgrignani, Carlo V. Catapano, Rolf Krause, Andrea Cavalli. Investigating STAT3 dimerization and its pharmacological modulation by molecular simulations.* Cecam Workshop: Models for Protein Dynamics 1976-2016, Lausanne (CH), 15-18 Febbraio 2016.

-*Jacopo Sgrignani, JingJing Chen, Alessio Ferrari, Giovanni Grazioso, Maura Garofalo, Alessandra Silvani, Andrea Alimonti and Andrea Cavalli. From functional mechanism to new therapeutic tools:*

reaction modelling and computational design of PDC inhibitors. 11th WATOC congress, Munich 27 agosto-1 settembre 2017.

-Maura Garofalo, Sara Ravasio, Milos Matkovic, Jacopo Sgrignani, Sonia Barbieri, Federica Sallusto, Antonio Lanzavecchia, Andrea Cavalli. **Identification of structural determinants of light chain amyloidosis.** BioExcell Summer School, Pula (Italia), 17-22 Giugno 2018. Premiato come miglior poster.

- Jacopo Sgrignani, JingJing Chen, Giovanni Grazioso, Maura Garofalo, Alessandra Silvani, Andrea Alimonti, and Andrea Cavalli. **Molecular modelling investigations on pyruvate dehydrogenase with an eye to drug design.** 6th CDDD Meeting COMPUTATIONALLY DRIVEN DRUG DISCOVERY. Marzo 28-29, 2019, Università Cattolica del Sacro Cuore, Roma, Italia.

Data

11/05/2020

Luogo

Almenno San Salvatore