

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

Procedura di selezione per la chiamata a professore di I fascia da ricoprire ai sensi dell'art. 18, comma 1, 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**, ( avviso bando pubblicato sulla GU n. 59 del 26/07/2022) - Codice concorso 5024

## CURRICULUM VITAE

<b>COGNOME E NOME</b>	Danilo Roccatano
<b>Indirizzo di casa</b>	12 Harewood Crescent
<b>Numero di telefono</b>	+44 793 9975503
<b>Indirizzo e-mail</b>	danilo.roccatano@gmail.com
<b>Nazionalità</b>	Italiano
<b>Data di nascita</b>	7/8/1967

### TITOLI

#### TITOLO DI STUDIO

Data	23/12/1992
Ente che ha rilasciato il titolo	Università di Roma "La Sapienza".
Tipologia di Laurea conseguita	Laurea in Chimica 110 e lode. Titolo tesi: <i>Determinazione della struttura dell'acquatrisimidazolecopper (II) solfato mediante dinamica molecolare e spettroscopia XANES.</i>

#### TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA

Data	10/9/1997
Ente che ha rilasciato il titolo	Università di Roma "La Sapienza".
Tipologia di Laurea conseguita	Dottorato in Chimica, Università degli Studi di Roma "La Sapienza ". Titolo Dissertazione: <i>Studio di sistemi molecolari complessi mediante metodi avanzati di dinamica molecolare.</i>

#### **TITOLI SCIENTIFICI NAZIONALI ITALIANI CONFERITI PER POSIZIONI DI PROFESSORE ORDINARIO ( "ABILITAZIONI SCIENTIFICHE NAZIONALI DI I FASCIA" )**

Professore ordinario di Fisica per le discipline di FISICA APPLICATA, DIDATTICA E STORIA DELLA FISICA <b>(02/D1)</b> , e FISICA TEORICA DELLA MATERIA <b>(02/B2)</b> .
Professore ordinario in Chimica per la disciplina dei FONDAMENTI DI SCIENZE CHIMICHE E DEI SISTEMI INORGANICI <b>(03/B1)</b> , e MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE <b>(03/A2)</b> .

**POSIZIONE ACCADEMICA ATTUALE**

Qualifica / Titolo	Docente (Senior Lecturer in applied mathematics)
Università	Università di Lincoln (Regno Unito)
Dipartimento	Scuola di Matematica e Fisica

**PRECEDENTI POSIZIONI PRESSO ALTRE UNIVERSITÀ**

Date (da .. a.. )	01.09.2014-01.06.2016
Nome dell'istituzione	Jacobs University Brema, Germania (università privata internazionale)
Posizione ricoperta	Professore Onorario
Principali attività/responsabilità	Ricerca in chimica fisica

Date (da .. a.. )	01.07.2009-31.08.2014
Nome dell'istituzione	Jacobs University Brema, Germania (università privata internazionale)
Posizione ricoperta	Professore in Chimica, Chimica Computazionale e Biotecnologie
Principali attività/responsabilità	Insegnamento a studenti universitari (principalmente chimica e ingegneria biochimica). Guida del gruppo di ricerca in chimica computazionale. Ruoli amministrativi.

Date (da .. a.. )	01.07.2005-30.06.2009
Nome dell'istituzione	Jacobs University Brema, Germania (università privata internazionale)
Posizione ricoperta	Docente universitario in Chimica, Chimica Computazionale e Biotecnologie
Principali attività/responsabilità	Insegnamento a studenti universitari (principalmente chimica e ingegneria biochimica). Guida del gruppo di ricerca in chimica computazionale. Ruoli amministrativi.

Date (da .. a.. )	01.07.2005-30.06.2009
Nome dell'istituzione	Jacobs University Brema, Germania (università privata internazionale)
Posizione ricoperta	Docente universitario in Chimica, Chimica Computazionale e Biotecnologie
Principali attività/responsabilità	Insegnamento a studenti universitari (principalmente chimica e ingegneria biochimica). Guida del gruppo di ricerca in chimica computazionale. Ruoli amministrativi.
Date (da .. a.. )	01.07.2005-30.06.2009
Nome dell'istituzione	Jacobs University Bremen (ex università internazionale di Brema), Germania (università privata internazionale)
Posizione ricoperta	Ricercatore

Principali attività/responsabilità	Insegnamento a studenti universitari (principalmente chimica e ingegneria biochimica). Guida del gruppo di ricerca in chimica computazionale. Ruoli amministrativi.
------------------------------------	---

Date (da .. a.. )	01.07.2005-30.06.2009
Nome dell'istituzione	Jacobs University Brema, Germania (università privata internazionale)
Posizione ricoperta	Docente universitario in Chimica, Chimica Computazionale e Biotecnologie
Principali attività/responsabilità	Insegnamento a studenti universitari (principalmente chimica e ingegneria biochimica). Guida del gruppo di ricerca in chimica computazionale. Ruoli amministrativi.
Date (da .. a.. )	01.07.2001-30.06.2003
Nome dell'istituzione	Dipartimento di Chimica, Ingegneria e Materiali. Università dell'Aquila (Italia).
Posizione ricoperta	Ricercatore a contratto.
Principali attività/responsabilità	Ricerca in chimica computazionale. Assistenza nell'insegnamento della chimica generale.

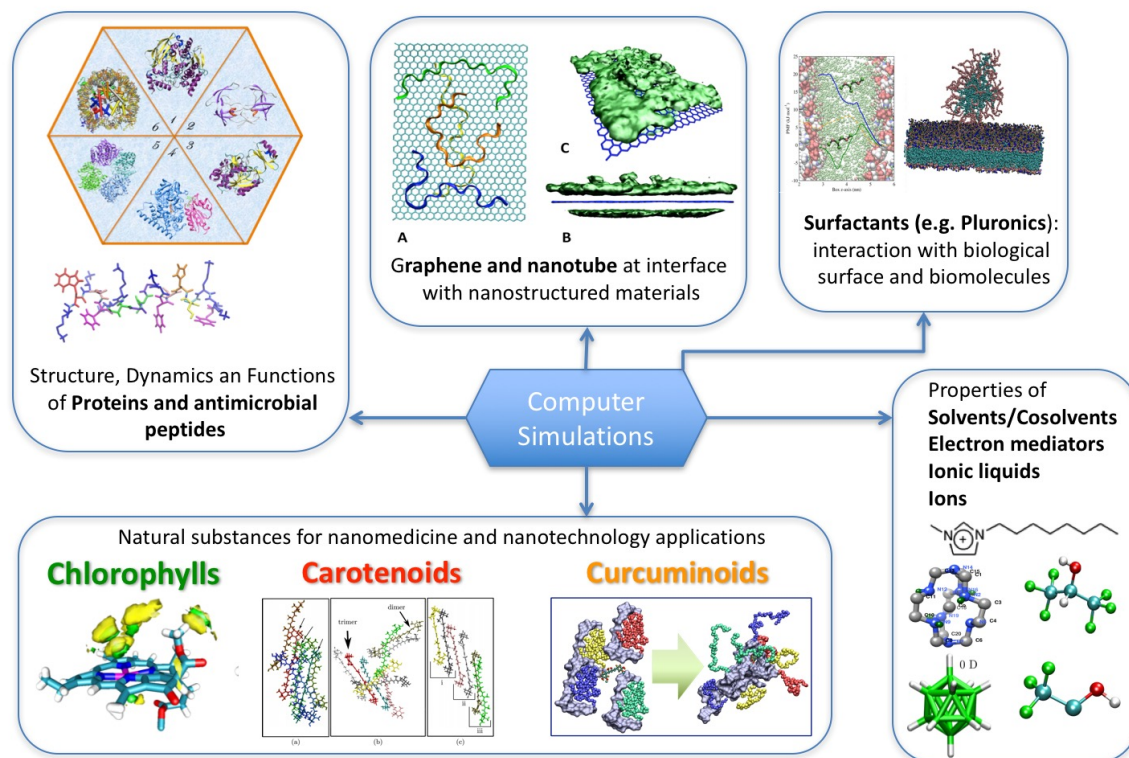
Date (da .. a.. )	01.01.2001-30.06.2001
Nome dell'istituzione	Dip. di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (Italia).
Posizione ricoperta	Ricercatore a contratto.
Principali attività/responsabilità	Ricerca in chimica computazionale.

Date (da .. a.. )	16.10.1996-01.11.2000
Nome dell'istituzione	Dipartimento di Chimica Biofisica, Università di Groningen, Paesi Bassi.
Posizione ricoperta	Ricercatore associato a tempo determinato.
Principali attività/responsabilità	Ricerca in chimica computazionale nel gruppo del prof. HJC Berendsen.

Date (da .. a.. )	01.07.1993-31.12.1993
Nome dell'istituzione	Posizione di ricerca presso CASPUR (Consorzio Interuniversitario per le Applicazioni di Supercalcolo per l'Università e la Ricerca), Roma, Italia.
Posizione ricoperta	Ricercatore a contratto.
Principali attività/responsabilità	Attività di ricerca

## ATTIVITÀ DI RICERCA SCIENTIFICA

Gli interessi di ricerca del Dott. Roccatano sono focalizzati sullo studio delle proprietà fisico-chimiche dei sistemi molecolari con rilevanza biologica e nanotecnologica utilizzando metodi di chimica/biologia computazionale. La figura seguente riassume graficamente le aree su cui è attualmente focalizzata la sua attività di ricerca.



Questi temi comprendono le seguenti due principali aree di ricerca:

- **Studio computazionale di nanomateriali.** La comprensione delle interazioni dei polimeri biocompatibili con i materiali nanostrutturati ha applicazioni tecnologiche critiche nell'industria e nella medicina. I copolimeri a blocchi sono ampiamente utilizzati per applicazioni nanotecnologiche e biomediche. Nonostante questo largo uso, i dettagli sul meccanismo di interazione dei polimeri con questi sistemi non sono ancora completamente compresi a livello molecolare. La ricerca su questo argomento mira a studiare le interazioni di polimeri nanostrutturati sia con interfacce biologiche che con nuovi nanomateriali utilizzando simulazioni al computer atomistiche multi-scala. Questi studi possono svelare meccanismi di interazione molecolare tra biomolecole e materiali polimerici che possono avere importanti applicazioni nella medicina molecolare e nella biotecnologia. La ricerca in quest'area è diretta allo studio della dinamica molecolare (DM) multi-scala di polimeri ibridi complessi/materiali biologici e allo studio computazionale di nanomateriali a base di carbonio.
- **Studio computazionale dei sistemi biologici.** Quest'area si comprende studi computazionali di molecole biologiche per comprenderne le dinamiche e le funzioni strutturali. Questa ricerca è focalizzata sulla comprensione degli effetti della temperatura, dei co-solventi e degli ioni sulle proprietà strutturali e dinamiche delle proteine di interesse biotecnologico e medico.

Le tre seguenti pubblicazioni (sottoposte a valutazione) sono le più importanti e rappresentative in termini di rilevanza e impatto accademico di queste due principali aree di attività di ricerca.

1. Ma W, Saccardo A, **Roccatano D**, Aboagye-Mensah D, Alkaseem M, Jewkes M, Di Nezza F, Baron M, Soloviev M, Ferrari E (2018). *Modular assembly of proteins on nanoparticles*. NATURE

COMMUNICATIONS, vol. 9, ISSN: 2041-1723. **DOI:** 10.1038/s41467-018-03931-4. Roccatano ha disegnato la parte computazionale. Ha inoltre eseguito le simulazioni di dinamica molecolare e l'analisi dei dati. Ha scritto e redato le sezioni computazionali del manoscritto. Journal IF: 14.919 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 64 (Scholar Google, 2022).

Questo articolo è rappresentativo dell'interesse allo studio dell'interazione di biomolecole con nanomateriali. In particolare, in questo studio collaborativo, viene esplorata con uno studio sperimentale e teorico combinato sulla possibilità di immobilizzare proteine modulari (Glutathione S-Transferasi, GST) su nanoparticelle d'oro (GNP) per applicazioni biotecnologiche e biomediche. Si è dimostrato che la proteina Spy-Catcher può essere immobilizzata in modo covalente sui GNP attraverso GST senza perdere la sua piena funzionalità. Inoltre, i risultati mostrano che la semplice miscelazione di particelle attivate da GST-Spy Catcher può quindi legare in modo covalente una proteina modificata SpyTag. L'orientamento della GST sulla superficie delle nanoparticelle può influenzare la capacità di legame con Spy Catcher. Pertanto, si sono usate simulazioni di DM atomistiche approssimando la superficie della nanoparticella a un modello planare di superficie d'oro rivestita con molecole di citrato. I modelli hanno fornito dei risultati qualitativi che possono essere usati per migliorare con i metodi di ingegneria proteica l'orientamento di GST sulla superficie della nanoparticella.

2. Onaca O, Sarkar P, **Roccatano D**, Friedrich T, Hauer B, Grzelakowski M, Gueven A, Fioroni M, Schwaneberg U (2008). *Functionalized nanocompartments (synthosomes) with a reduction-triggered release system*. ANGEWANDTE CHEMIE. INTERNATIONAL EDITION, vol. 47, p. 7029-7031, ISSN: 1433-7851. **DOI:** 10.1002/anie.200801076. Roccatano ha disegnato ed eseguito tutte le parti di modellazione. Inoltre, ha scritto e redato le sezioni computazionali del manoscritto. Journal IF: 16.823 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 78 (Scholar Google, 2022).

Lo studio nel secondo articolo è rappresentativo dell'altra importante area della mia attività di ricerca che coinvolge lo studio del biopolimero all'interfaccia di nanomateriali nanostrutturati quali i polimeri. L'articolo contiene una dimostrazione di realizzazione di un sistema di rilascio chimico per nanocontenitori polimerici basato su una proteina di membrana batterica modificata. Sono state usate proteine batteriche transmembrana specializzate che possono essere facilmente incorporate nella membrana polimerica fornendo una nanovalvola pronta all'uso per applicazioni biomediche e biotecnologici. Finora sono state utilizzate per questo scopo tre proteine transmembrana batteriche (OmpF, Tsx e FhuA). Il nanocontenitore ibrido proteina/polimero è stato chiamato Sintosoma. Lo studio ha combinato tecniche di ingegneria proteica, di modificazione chimica delle proteine, e di modellazione molecolare per costruire con successo un sintosoma utilizzando una proteina FhuA trasformata in una valvola di rilascio attivata dalla lisi per riduzione chimica di catene laterali degli amino acidi nel canale interno della proteina. Nonostante il successo sperimentale di questo progetto, molti aspetti dei meccanismi di questo dispositivo molecolare rimangono irrisolti e richiedono ulteriori indagini utilizzando metodi computazionali.

3. **Roccatano D**, Colombo G, Fioroni M, Mark AE (2002). *Mechanism by which 2,2,2-trifluoroethanol/water mixtures stabilize secondary-structure formation in peptides: A molecular dynamics study*. PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA, vol. 99, p. 12179-12184, ISSN: 0027-8424. **DOI:** 10.1073/pnas.182199699. Roccatano è l'autore corrispondente dell'articolo. Ha progettato lo studio ed eseguito parte delle simulazioni e analisi dei dati. Ha anche contribuito alla scrittura e alla modifica del manoscritto. Journal IF: 11.205 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 552 (Scholar Google, 2022).

Il terzo lavoro ha rappresentato il contributo di Roccatano allo studio delle proprietà di peptidi e proteine in acqua e miscele con solventi organici. Il principale risultato di ricerca in questo campo è lo sviluppo di modelli accurati di alcoli fluorurati (come TFE e HFIP). Questi modelli sono stati utilizzati per svelare il meccanismo di stabilizzazione della struttura secondaria di diversi peptidi in soluzione mediato da co-solventi fluorurati. I risultati hanno evidenziato l'importanza dell'effetto di assorbimento e rivestimento del peptide da parte del co-solvente come meccanismo di stabilizzazione della struttura secondaria dei peptidi. Questo articolo è il più citato nella produzione scientifica di Roccatano. È stato seguito da molti altri articoli e recensioni su questa principale area di ricerca con applicazioni nella biotecnologia e implicazioni nell'esobiologia.

Nella parte che segue, verranno riportati in modo più specifico alcuni progetti di ricerca in corso con le relative pubblicazioni. Le successive 17 pubblicazioni (sottoposte a valutazione) sono state selezionate in base alla loro

rilevanza in base all'IF della rivista, alle citazioni e alla leadership scientifica e/o al contributo principale alla ricerca.

### **Studi teorici degli effetti di co-solventi e tensioattivi sulle proprietà di piccole molecole e peptidi in soluzione.**

La nanotecnologia fornisce nuovi strumenti diagnostici e terapeutici alla scienza medica con potenziali impatti sociali ed economici. In particolare, lo sviluppo di nanocarrier per sistemi mirati di somministrazione di farmaci può affrontare gli attuali limiti dei farmaci tradizionali. Tra le possibili applicazioni, questi nanodispositivi possono migliorare il trasporto di medicinali poveri solubili verso un tipo specifico di cellule del corpo umano. Diversi nanocarrier polimerici sono stati sviluppati e sono attualmente oggetto di studio anche a livello di sperimentazioni cliniche. Nonostante questa pleora di studi sperimentali, le descrizioni molecolari dettagliate dei processi di assorbimento e rilascio dei farmaci da parte dei polimeri sono ancora limitate. In questo progetto si utilizzano simulazioni di DM per studiare le interazioni di polimeri a base di polietere di diversa morfologia con farmaci e molecole con una significativa potenzialità come agenti terapeutici. L'obiettivo principale del progetto è capire come le proprietà strutturali e chimiche di queste molecole possono influenzare la loro interazione con i polimeri e viceversa. Queste informazioni potrebbero essere utilizzate per migliorare la progettazione dei sistemi di somministrazione dei farmaci.

4. Samanta S, **Roccatano D** (2013). *Interaction of Curcumin with PEO-PPO-PEO Block Copolymers: A Molecular Dynamics Study*. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. B, CONDENSED MATTER, MATERIALS, SURFACES, INTERFACES & BIOPHYSICAL, vol. 117, p. 3250-3257, ISSN: 1520-6106. **DOI:** 10.1021/jp309476u. Roccatano è l'autore corrispondente dell'articolo e supervisore del dottorato di ricerca del primo autore. Ha progettato lo studio, il tipo di simulazioni di DM e l'analisi dei dati. Ha anche contribuito alla scrittura e alla modifica del manoscritto. Journal IF: 3.466 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 56 (Scholar Google, 2022).
5. Samanta S, Hezaveh S, Milano G, **Roccatano D** (2012). *Diffusion of 1,2-Dimethoxyethane and 1,2-Dimethoxypropane through Phosphatidylcholine Bilayers: A Molecular Dynamics Study*. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. B, CONDENSED MATTER, MATERIALS, SURFACES, INTERFACES & BIOPHYSICAL, vol. 116, p. 5141-5151, ISSN: 1520-6106. **DOI:** 10.1021/jp211564x. Roccatano è l'autore corrispondente dell'articolo e supervisore del dottorato di ricerca dei primi due autori. Ha progettato lo studio, il tipo di simulazioni e analisi dei dati. Ha anche contribuito alla scrittura e alla modifica del manoscritto. Journal IF: 3.466 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 31 (Scholar Google, 2022).
6. Hezaveh S, Samanta S, Milano G, **Roccatano D**. *Molecular dynamics simulation study of solvent effects on conformation and dynamics of polyethylene oxide and polypropylene oxide chains in water and common organic solvents*. J. Chem. Phys. 136, 124901 (2012). **DOI:** 10.1063/1.3694736. Roccatano è l'autore corrispondente dell'articolo e supervisore del dottorato di ricerca dei primi due autori. Ha progettato lo studio, il tipo di simulazioni e analisi dei dati. Ha anche contribuito alla scrittura e alla modifica del manoscritto. Journal IF: 4.304 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 57 (studioso Google).
7. Hezaveh S, Samanta S, De Nicola A, Milano G, **Roccatano D** (2012). *Understanding the Interaction of Block Copolymers with DMPC Lipid Bilayer Using Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations*. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. B, CONDENSED MATTER, MATERIALS, SURFACES, INTERFACES & BIOPHYSICAL, vol. 116, p. 14333-14345, ISSN: 1520-6106. **DOI:** 10.1021/jp306565e. Roccatano è l'autore corrispondente dell'articolo e supervisore del dottorato di ricerca dei primi due autori. Ha progettato lo studio, il tipo di simulazioni e analisi dei dati. Ha anche contribuito alla scrittura e alla modifica del manoscritto. Journal IF: 3.466 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 76 (studioso Google).
8. Fioroni M, Burger K, Mark AE, **Roccatano D** (2000). *A new 2,2,2-trifluoroethanol model for molecular dynamics simulations*. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. B, CONDENSED MATTER, MATERIALS, SURFACES, INTERFACES & BIOPHYSICAL, vol. 104, p. 12347-12354, ISSN: 1520-6106. **DOI:** 10.1021/jp002115v. Roccatano è l'autore corrispondente dell'articolo. Ha progettato lo studio, eseguito parte delle simulazioni di DM e analisi dei dati. Ha anche scritto gran parte del manoscritto. Journal IF: 3.466 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 117 (Scholar Google, 2022).

9. Karki K, **Roccatano D** (2011). *Molecular Dynamics Simulation Study of Chlorophyll a in Different Organic Solvents*. JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION, vol. 7, p. 1131-1140, ISSN: 1549-9618. **DOI:** 10.1021/ct1004627. Roccatano è l'autore corrispondente del paper e supervisore del dottorato di ricerca del primo autore. Ha progettato lo studio, il tipo di simulazioni e l'analisi dei dati. Ha anche contribuito alla scrittura e alla modifica del manoscritto. Journal IF: 6.578 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 36 (Scholar Google, 2022).
10. Karki K, Gabel D, **Roccatano D** (2012). *Structure and Dynamics of Dodecaborate Clusters in Water*. INORGANIC CHEMISTRY, vol. 51, p. 4894-4896, ISSN: 0020-1669. **DOI:** 10.1021/ic300223z. Roccatano è l'autore corrispondente dell'articolo e supervisore del dottorato di ricerca del primo autore. Ha progettato lo studio, il tipo di simulazioni e l'analisi dei dati. Ha anche contribuito alla scrittura e alla modifica del manoscritto. I cluster di boro sono elementi costitutivi insoliti per materiali come liquidi ionici, ottica non lineare ed estrazione di radionuclidi e per applicazioni mediche come inibitori enzimatici. Pertanto, un modello accurato per studiarne le proprietà e l'interazione è molto importante. Questo studio riporta il primo modello per simulazioni di dinamica molecolare classica di diversi cluster di dodecaborato. Journal IF: 5.436 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 47 (Scholar Google, 2022).

**Autoassemblaggio di molecole fotoattive sulla superficie di nanomateriali.** I nanomateriali di carbonio, come i nanotubi di carbonio cavi (CNT) e i nanosheet di grafene planare (GNS), possiedono molte proprietà peculiari, che li rendono attraenti per le applicazioni in nanotecnologia, elettronica e nanomedicina. Ad esempio, nell'ambito della nanomedicina, è stato mostrato che i CNT possono agire come bloccanti dei canali ionici, muscoli artificiali, sensori e veicoli per la somministrazione di farmaci. Inoltre, l'aggiunta di ancoranti molecolari sulle loro superfici apre la strada alla creazione di interfacce funzionali per applicazioni mirate. Un esempio è la creazione di nanosensori usa e getta (per la diagnostica sanitaria e il monitoraggio alimentare o ambientale) o dispositivi per la cattura di energia (*energy harvesting*). Per queste applicazioni, è fondamentale comprendere i meccanismi d'interazione di questi nuovi materiali con le molecole attive a livello molecolare. Tuttavia, i dettagli dell'auto-organizzazione strutturale e dinamica delle molecole assorbite sulle superfici di questi nanomateriali devono ancora essere esplorati in dettaglio.

Pertanto, in questo progetto si utilizzano metodi computazionali per studiare l'adsorbimento e l'auto-organizzazione di piccole molecole su nanomateriali 2D (principalmente CNT e GNS). L'obiettivo principale del progetto è capire come le proprietà strutturali e chimiche di queste molecole possono influenzare la loro interazione e assemblaggio su queste superfici. In particolare, lo studio coinvolge molecole biologicamente foto-attive come curcumina, porfirine, clorofille, carotenoidi. I risultati di questi studi possono essere utili a migliorare la progettazione dei nanodispositivi per applicazioni in sensoristica e fotosintesi artificiale.

## **Pubblicazioni selezionate**

11. Soloviev M, Siligardi G, **Roccatano D**, Ferrari E (2022). *Adsorption of the RBD of the SARS-CoV-2 virus at the solid-liquid interface*. J. of Colloid and Interface Science, 605, 286-295. **DOI:** 10.1016/j.jcis.2021.07.072. Roccatano ha disegnato la parte computazionale dell'articolo. Ha inoltre eseguito le simulazioni di dinamica molecolare e l'analisi dei dati. Ha scritto e redatto le sezioni computazionali del manoscritto. Journal IF: 9.965 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 2 (Scholar Google, 2022).
12. Zangi R, **Roccatano D** (2016). *Strings-to-Rings Transition and Antiparallel Dipole Alignment in Two-Dimensional Methanols*. NANO LETTERS, vol. 16, p. 3142-3147, ISSN: 1530-6984. **DOI:** 10.1021/acs.nanolett.6b00460. Roccatano ha contribuito alla progettazione della ricerca. Ha svolto parte delle simulazioni dinamiche molecolari e dell'analisi dei dati. Ha anche scritto e curato parte del manoscritto. Journal IF: 12.262 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 12 (Scholar Google, 2022).
13. Sarukhanyan E, Milano G, **Roccatano D** (2014). *Coating Mechanisms of Single-Walled Carbon Nanotube by Linear Polyether Surfactants: Insights from Computer Simulations*. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. C, vol. 118, p. 18069-18078. **DOI:** 10.1021/jp501559x. Roccatano è l'autore corrispondente dell'articolo e supervisore del dottorato di ricerca del primo autore. Ha progettato lo studio ed eseguito parte delle simulazioni e analisi dei dati. Ha anche contribuito alla scrittura e alla modifica del manoscritto. Journal IF: 4.177 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 12 (Scholar Google, 2022).

14. **Roccatano D**, E. Sarukhanyan, R. Zangi (2017). *Adsorption Mechanism of an Antimicrobial Peptide to Single-Walled Carbon Nanotubes: A Molecular Dynamics Study*. DOI: 10.1063/1.4975689. J. Chem. Phys., 146, 074703. **COVER PAGE**. Roccatano è l'autore corrispondente dell'articolo. Ha progettato lo studio, eseguito la maggior parte delle simulazioni e analisi dei dati. Ha scritto il manoscritto. Journal IF: 3.520 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 25 (Scholar Google, 2022).
15. Pal S, **Roccatano D**, Weiss H, Keller H, Müller-Plathe F (2005). *Molecular dynamics simulation of water near structured hydrophobic surfaces: interfacial energies*. ChemPhysChem, 6, 1641-1649. DOI: 10.1002/cphc.200500074. Roccatano ha contribuito supervisionando il primo autore per la messa a punto delle simulazioni dinamiche molecolari e per l'analisi dei dati. Ha anche aiutato a preparare e modificare parte del manoscritto. Journal IF: 3.520 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 25 (Scholar Google, 2022).

**Studio teorico della struttura e della dinamica delle molecole biologiche.** Il progetto utilizza simulazioni MD a livello atomistico degli effetti di solventi e tensioattivi sulle proprietà strutturali e dinamiche di peptidi e piccole molecole. Lo studio dell'interazione dei biopolimeri con substrati non acquosi ha molte implicazioni necessarie in biotecnologia e medicina. Per questo motivo, è assolutamente fondamentale comprendere proprietà come stabilità, diffusività e solubilità in questi ambienti. Il progetto si propone di studiare questi fenomeni utilizzando il metodo delle simulazioni al computer per comprendere come l'ambiente non acquoso influenzi la stabilità e la reattività delle macromolecole biologiche. A tal fine, è essenziale ottenere modelli di campo di forza accuratamente ottimizzati di co-solventi e co-soluti da utilizzare nella simulazione della dinamica molecolare. Questi modelli vengono quindi utilizzati per studiare peptidi e proteine in questi solventi e tensioattivi. Roccatano è inoltre interessato a comprendere la solvatazione preferenziale e la dinamica di queste molecole di solventi misti sulle superfici e nelle cavità delle molecole biologiche.

16. Sahoo H, **Roccatano D**, Hennig A, Nau WM (2007). *A 10-angstrom spectroscopic ruler applied to short polypyrrolines*. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, vol. 129, p. 9762-9772. DOI: 10.1021/ja072178s. Roccatano ha disegnato la parte computazionale dell'articolo. Ha inoltre eseguito le simulazioni di dinamica molecolare e l'analisi dei dati. Ha scritto e redatto le sezioni computazionali del manoscritto. Journal IF: 16.383 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 100 (Scholar Google, 2022).
17. Sahoo H, **Roccatano D**, Zacharias M, Nau WM (2006). *Distance distributions of short polypeptides recovered by fluorescence resonance energy transfer in the 10-angstrom domain*. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, vol. 128, p. 8118-8119. DOI: 10.1021/ja062293n. Roccatano ha disegnato la parte computazionale dell'articolo. Ha inoltre eseguito le simulazioni di dinamica molecolare e l'analisi dei dati. Ha scritto e redatto le sezioni computazionali del manoscritto. Journal IF: 16.383 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 79 (Scholar Google, 2022).
18. Kuper J, Wong TS, **Roccatano D**, Wilmanns M, Schwaneberg U (2007). *Understanding a mechanism of organic cosolvent inactivation in heme monooxygenase P450BM-3*. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, vol. 129, p. 5786-5787. DOI: 10.1021/ja067036x. Roccatano ha disegnato la parte computazionale dell'articolo. Ha inoltre eseguito le simulazioni di dinamica molecolare e l'analisi dei dati. Ha scritto e redatto le sezioni computazionali del manoscritto. Il citocromo P450BM3 è una proteina modello sia per studi teorici sulla funzionalità dei citocromi che per applicazioni biotecnologiche. Ad esempio, questa è una delle proteine modello utilizzate dalla prof.essa Francis Arnold per i suoi studi sui metodi evoluzione controllata delle proteine per i quali è stata insignita del Nobel per la chimica nel 2018. In collaborazione con i gruppi del Prof Schwaneberg (RWTH di Aquisgrana, Germania) e del Prof. Wilmann (DESY sincrotrone di Amburgo, Germania) abbiamo studiato per vari anni il dominio catalitico con il sito attivo di questo enzima analizzando diversi aspetti funzionali confrontando i dati cristallografici e di mutagenesi con simulazioni di DM. In questo articolo abbiamo presentato la struttura cristallografica del dominio catalitico della P450BM3 cristallizzato in presenza del co-solvente DMSO. La struttura ci ha permesso di svelare alcuni aspetti dell'interazione dei co-solventi con il sito attivo dell'enzima utili per comprendere il loro effetto sulla funzionalità enzimatica in miscele di solventi organici con acqua. Journal IF: 16.383 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 65 (Scholar Google, 2022).



19. Verma R, Schwaneberg U, **Roccatano D** (2014). *Insight into the Redox Partner Interaction Mechanism in Cytochrome P450BM-3 Using Molecular Dynamics Simulations*. Biopolymers, vol. 101, p. 197-209. **DOI:** 10.1002/bip.22301. Roccatano è l'autore corrispondente dell'articolo e supervisore del dottorato di ricerca del primo autore. Egli ha progettato lo studio e le simulazioni di DM. Ha anche contribuito alla scrittura e alla redazione del manoscritto. In questo articolo, per la prima volta, esploriamo utilizzando metodi computazionali il possibile trasferimento elettronico tra un donatore di elettrone e il sito catalitico: un passo essenziale per l'attività catalitica della molecola. Lo studio può fornire spunti rilevanti per guidare la progettazione di versione modificate della proteina per le applicazioni biotecnologiche e chimiche. Journal IF: 2.240 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 17 (studioso Google).
20. Di Nola A., **Roccatano D.**, Berendsen H. J. C. (1994). *Molecular dynamics simulation of the docking of substrates to proteins*. Proteins: Struct., Funct., Genet., 19, 174-182. **DOI:**10.1002/prot.340190303. Roccatano ha contribuito eseguendo tutte le simulazioni di DM e l'analisi dei risultati. Ha anche aiutato a preparare parte del manoscritto. L'articolo riporta il primo metodo che utilizza la dinamica molecolare per effettuare il docking di un piccolo ligando con una proteina. Solo recentemente la DM inizia ad essere ampiamente utilizzato per simulazioni di docking grazie all'enorme incremento delle prestazioni delle simulazioni DM che c'è stato dalla pubblicazione di questo articolo. Per questo motivo, questo articolo contiene un lavoro pionieristico e come tale continua ad essere continuamente citato. Journal IF: 4.088 (Clarivate Analytics, 2022). Citazioni: 155 (Scholar Google, 2022).

## COORDINAMENTO DI GRUPPI E PROGETTI DI RICERCA

Dal 2008 coordino e gestisco un gruppo di ricerca indipendente in chimica computazionale e biofisica. Il membro attuale e passato del gruppo sono elencati di seguito.

## ATTUALI MEMBRI DEL GRUPPO DI RICERCA

1. Prof. Karen C. Weber. Professore associato presso l'Università Federale di Paraíba, Brasile.
2. Lauren Bartie (studentessa di laurea magistrale in Matematica, 2022), University of Lincoln, Regno Unito.

## MEMBRI DEL GRUPPO PASSATI (la posizione attuale è indicata tra parentesi).

1. Prof. Karen C. Weber. Professore associato presso l'Università Federale di Paraíba, Brasile. Periodo di ricerca per la formazione post-dottorato 2019-2020.
2. Dott. Susruta Samanta (Università Manipal Jaipur, India).
3. Dr Rajni Verma (Wichita State University, USA).
4. Dott.ssa Samira Hezaveh ( Technische Universität Hamburg, Germania).
5. Dr Khadga Karki (Guangdong Technion-Israel Institute of Technology, Cina).
6. Dott.ssa Edita Sarukhanyan (Università di Wuerzburg, Germania).
7. Dr Zhenwei Li (R&S Bontac Bioingegneria, Cina).
8. Dr Amol Shivange (Novozymes, India).
9. Dr Ronny Martinezmoya ( Universidad de La Serena, Cile).
10. Dr Aamir Shehzad (KAUST, Pakistan).
11. Sig. Alaa Othman (Università di Zurigo, Svizzera).
12. Miss Andrea Scacioc (Istituto Max Planck di Gottinga, Germania).

## COLLABORAZIONI ATTUALI E PASSATE

## CON COLLEGHI ACCADEMICI

1. Dr Kadgha Karki (Guangdong Technion-Israel Institute of Technology). *Progetto: Studio sperimentale e computazionale dei pigmenti fotosintetici.*
2. Dott. Enrico Ferrari (Università di Lincoln, Regno Unito). *Progetto: Interazione di proteine con nanoparticelle di oro e silice.*
3. Prof Karen C. Weber professore associato in Chimica Fisica presso l'Università Federale di Paraíba (UFPB). *Progetto: Recettore metabotropico del glutammato 5.*
4. Dr Richard Ngomba (Università di Lincoln, Regno Unito). *Progetto: Recettore metabotropico del glutammato 5.*
5. Dr Steven Hayward (Università dell'East Anglia, Regno Unito). *Progetto: Studio del movimento allosterico di domini strutturali di enzimi indotto da ligandi.*
6. Prof Christy A. Hunter (Università di Lincoln, Regno Unito). Progetto UE Marie Skłodowska -Curie Innovative Training Networks, DIRNANO.
7. Jyh-Yeuan Lee (Università di Ottawa, CAN). *Progetto: progettazione strutturata di anticorpi neutralizzanti contro SARS-CoV-2.*
8. Prof Ronen Zangi , Ph.D (IKERBASQUE. Basque Foundation for Science, Spagna). *Progetto: Proprietà del monostrato di solvente sulla superficie del grafene.*
9. Prof Dr Ulrich Schwaneberg . (RWTH Aquisgrana, Germania). *Diversi progetti di ingegneria proteica computazionale e modellistica strutturale.*
10. Prof Dott. Giorgio Colombo. (Università di Pavia e Istituto di Riconoscimento Molecolare CNR, Milano, Italia). *Studi di dinamica molecolare sul folding e della dinamica in soluzione di peptidi.*
11. Prof. Martin Zacharias ( Technische Universität München, Germania). *Progetto: Studi teorici sulla dinamica in soluzione di protein e peptidi.*
12. Prof Dott. Giuseppe Milano (Università degli Studi di Salerno, Italia). *Progetto: studio dell'interazione dei nanomateriali con i sistemi biologici .*
13. Prof Alfredo Di Nola (Università di Roma "La Sapienza", Italia). *Diversi studi teorici di dinamica molecolare di liquidi e biopolimeri. Sviluppo del metodo di docking basato sulla dinamica molecolare. Applicazioni della dinamica molecolare alla spettroscopia EXAFS e XANES.*
14. Prof Dott. Massimiliano Aschi (Università dell'Aquila, Italia). *Progetto: studio teorico della dinamica delle connessa con le proprietà elettrochimiche e spettroscopiche.*
15. Dr Tuck S. Wong (Università di Sheffield, Regno Unito). *Progetto: sviluppo di strumenti per l'ingegneria proteica e l'evoluzione diretta delle proteine.*
16. Dr Kang Lan Tee (Università di Sheffield, Regno Unito). *Progetto: studio degli effetti di liquidi ionici sulla protein citocromo P450 BM3.*
17. Dott.ssa Andrea Amadei (Università degli Studi di Roma "Tor Vergata ", Italia). *Diversi studi teorici di dinamica molecolare di liquidi e biopolimeri. Sviluppo di nuovi metodi di meccanica statistica per studiare per proprietà di proteine e piccole molecole in soluzione.*
18. Prof Dr Alan Mark (Università del Queensland, Australia). *Studi della dinamica dei peptidi in soluzione non acquosa.*
19. Prof Dr Herman JC Berendsen (Università di Groningen, Paesi Bassi). *Studi sulla dinamica di ioni e peptidi in soluzione. Sviluppo del metodo di docking basato sulla dinamica molecolare.*

## CON AZIENDE NEL SETTORE DELLE BIOTECNOLOGIE

1. **SeSaM Biotech, Aachen, Germania.** 2009-2011. Project: *Advancements in Step 1 and 2 of SeSaM (Sequence Saturation Mutagenesis).*

2. **BASF AG, Ludwigshafen, Germania.** 2007-2010. Project: *Optimierung einer Phosphatase.*
3. **BRAIN AG (Biotechnology Research and Information Network Aktiengesellschaft), Zwingenberg, Germania.** 2007. project: *Modelling of a sugar Isomerase with different substrates.*
4. **EVONIK (DEGUSA AG Direkt Company Funding), Marl, Germania.** 2008. Project: *In silico modelling of Hydrolases.* 2007. Project: *Optimierung einer Malonyl-CoA-Dehydrogenase.*

## **ELENCO PROGETTI FINANZIATI**

### **IN PREPARAZIONE**

- "Meccanismo di interazione molecolare di nanomateriali a base di polietere con molecole biologiche".
- "Meccanismi di immobilizzazione di Molecole biologiche sulla superficie delle nanoparticelle" in collaborazione con E. Ferrari (University of Lincoln, UK).
- "Evoluzione adattativa della dinamica del dominio funzionale nelle proteine da organismi estremofili". in collaborazione con S. Hayward (University of East Anglia, UK).

### **FINANZIATI**

L'importo cumulativo dei fondi ottenuti e utilizzato per sostenere la ricerca e gli studenti nel mio gruppo corrisponde a circa 500000 € (il finanziamento totale ottenuto corrisponde a circa 1750000 €). I progetti sono stati finanziati da fondazioni di ricerca tedesche, britanniche ed europee. I fondi sono serviti a portare avanti progetti in collaborazione con altri gruppi accademici e aziende tedesche del settore biotecnologico. Le borse di studio hanno finanziato undici tesi di dottorato e diverse tesi di laurea magistrale. I risultati, pubblicati in decine di giornali specializzati internazionali, sono stati presentati in diverse conferenze internazionali. Inoltre, il progetto in collaborazione con aziende nel settore biotecnologico hanno contribuito alla ricerca di nuovi possibili prodotti con potenziali applicazioni nell'industria alimentare e chimica.

**2020:** **Progetto collaborativo finanziato dalla UE Marie Skłodowska-Curie Innovative Training Networks (DIRNANO, 956544):** Titolo del progetto: *"Directing the immune response through designed nanomaterials"*. Partecipazione come collaboratore scientifico.

**Accesso supercalcolatore presso EPSRC Tier-2 Isambard G4W Alliance, Regno Unito.** Titolo del progetto: *"Self-Assembly of Biological Molecules on Nanoparticle Surface"* (1 gennaio 2020-31 dicembre 2020). Titolare del progetto. Finanziamento risorse computazionali equivalente a **£ 1.500**.

**2018:** **Programma di finanziamento interno per la ricerca. College of Science, Università di Lincoln.** Titolare del progetto. Finanziamento: **~1500 €**.

**2018-2019:** **Accesso supercalcolatore Cirrus EPSRC Tier-2, Edimburgo, Regno Unito.** Titolo del progetto: *"Self-assembly of Photoactive Molecules on the surface of Two-dimensional Nanomaterials "*. Titolare del progetto. Finanziamento risorse computazionali equivalente a **~1500 €**.

**2018:** **Accesso supercalcolatore ARCHER, Edimburgo, Regno Unito.** *Computer time finanziato dall'ente governativo per la ricerca EPSRC.* Titolo del progetto: *"Molecular Dynamics Simulations Study of Absorption Mechanisms of Peptides by Polyether Block Copolymers"*. Titolare del progetto. Finanziamento delle risorse computazionali equivalente a **~3000 €**.

- 2016:** **Accesso supercalcolatore ARCHER, Edimburgo, Regno Unito.** Computer time per il progetto: "*Study of the Thermodynamics of Domain Motion in Citrate Synthase using Molecular Dynamics Simulations and Umbrella Sampling Methods*". Titolare del progetto. Finanziamento delle risorse computazionali equivalente a **~1000 €**.
- 2008-2012:** **Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG).** Titolo: "*The Study of Detailed Mechanisms Of Polymer/Biological Membrane Interactions Using Computer Simulations*" (Rif. N.: RO 3571/3-1). Titolare del progetto. Finanziamenti per due dottorandi (S. Hezaveh e S. Samanta) Finanziamento totale: **€ 240000**.
- 2008-2012:** **7 EU frameworks grant (Collaborative Project large-scale integrating projects).** Titolo: "*OXYGREEN: Effective Re-Design Of Oxidative Enzymes For Green Chemistry*". Collaboratore scientifico. Coordinatore tedesco del progetto Prof U. Schwaneberg (RWTH Aachen University, Germany). Borsa di studio quadriennale per un dottorando. Finanziamento: **60000 €**.
- 2010/2011:** **Norddeutscher Verbo zur Förderung der Hoch- und Höchstleistungsrechnern (HLRN ).** Titolo: "*Molecular Simulation Studies of the interaction of weakly coordinating ions with biological interfaces*". Titolare del Progetto. Finanziamento per tempo informatico pari a **€ 20000** .
- 2010:** **DFG Großgeräteantrag "Computer-cluster".** Richiesta di investimento per un supercomputer per l'Università Jacobs di Brema, Germania. Partecipazione come co-applicante. Coordinatore del progetto: Prof. T. Heine. Finanziamento totale per il computer: **€ 675000** .
- 2009-2011:** **Sesam Biotech.** Titolo: "*Advancements in Step 1 and 2 of SeSaM (Sequence Saturation Mutagenesis)*". Borsa di studio per la durata di 2 anni per il finanziamento di il dottorato di ricerca per lo studente Andreas Scacioc. Finanziamento: **€ 24000**.
- 2008-2011:** **BMBF " Bioindustria 2021" .** Schwanberg /Roccatano. Titolo: „ *Nukleasen und Proteasen Mit Verbesserten Eigenschaften Für Die Molekulare Praanalytik*". Coordinatore del progetto: Prof U. Schwaneberg (RWTH Aachen University). Co-tutore di uno dei dottorandi assegnatari. Somma totale finanziata: **€ 430.000**. Finanziamento: **€ 40000** .
- 2008:** **DFG Großgeräteantrag "Holobench".** Richiesta d'investimento per un proiettore stereoscopico immersivo (holobench) per la Jacobs University Brema, Germania. Coordinatore del progetto. prof L. Linsen. Partecipazione come co-applicante. Finanziamento: **€ ~150000**.
- 2007-2010: BASF AG.** Titolo del progetto: "*Optimierung Einer Fosfatasi* ." Coordinatore del progetto: Prof. U. Schwaneberg (RWTH Aachen University). Co-tutore di uno dei dottorandi assegnatari. Somma totale finanziata: **€ 113750**. Finanziamento: **€ 40000**.
- 2008 :** **EVONIK (DEGUSSA AG Direkt Company Funding).** Investigatore principale. Titolo del progetto: "*In Silico Modelling of Hydrolases*". Investigatore principale. Finanziamento: **€ 15000**.
- 2007-2008:** **EVONIK (DEGUSSA AG Direkt Company Funding).** Investigatore principale. Titolo del progetto: "*Optimierung Einer Malonil- Coa -Deidrogenasi*".

Finanziamento: **€ 15000.**

- 2007:** **BRAIN AG (Rete di ricerca e informazione sulla biotecnologia Aktiengesellschaft).** Investigatore principale. Titolo del progetto: "*Modelling of A Sugar Isomerase with Different Substrates*".  
Finanziamento: **3500 €.**
- 2006 :** **BMBF Biochance Plus .** Titolo del progetto: "*Universelle Hochdurchsatz Durchmusterung Sistema zum Auffinden und Verbessern industriell bedeutsamer Biokatalysatoren in Metagenom - und Zufallsmutagenese-Bibliotheken*".  
Coordinatore del progetto Prof U. Schwaneberg . Fondi per dottoranda triennale in co-tutela con Schwaneberg .  
Finanziamento: **€ 36000.**
- 2002 :** Progetto **Vigoni 2001-2002 .** Titolo: "*Optimization of Fluorinated Alcohols/Water Mixture Models for Molecular Simulations Study Of Stability And Folding Of Peptides In Solution*". Co-partecipante. Collaborazione progetto tra l'Università dell'Aquila e l'Università di Lipsia (gruppo del Prof K. Bruger).  
Finanziamento: **€ 5000.**

## **REPUTAZIONE NAZIONALE E INTERNAZIONALE E ATTIVITÀ PROFESSIONALE**

### **PREMI**

- 2001 :** Assegno di ricerca per *lo studio di simulazioni di dinamica molecolare delle interazioni proteina-substrato* dell'Università dell'Aquila.
- 1993:** Assegno di ricerca per lo sviluppo del programma di Dinamica Molecolare su calcolatore parallelo "Quadrics" ( Alenia -Italia) dal CASPUR (Consorzio Interuniversitario per le Applicazioni di Supercalcolo per l'Università e la Ricerca), Roma, Italia.

### **QUALIFICA SCIENTIFICA NAZIONALE**

**maggio 2022:** Abilitazione Scientifica Nazionale (ASN) dal Ministro italiano del Formazione, Università e Ricerca per Professore Ordinario in Fisica per le discipline:

- FISICA APPLICATA, DIDATTICA E STORIA DELLA FISICA **(02/D1),**
- FISICA TEORICA DELLA MATERIA **(02/B2).**

**maggio 2019:** Abilitazione Scientifica Nazionale (ASN) dal Ministro italiano del Formazione, Università e Ricerca per Professore Ordinario di Chimica per la disciplina

- FONDAMENTI DI SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI **(03/B1),**
- MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE **(03/A2).**

### **ALTRE ATTIVITÀ E ONORI**

- **Dicembre 2020:** Nominato membro Fellow della Royal Society of Chemistry.
- **01.09.2014-01.06.2016:** *Professore Onorario* , Università Jacobs di Brema, Germania.
- **9/6/2013-30/6/2013:** Visiting professor presso la University of East Anglia (UK).

- **1/2/2013-31/7/2013:** Congedo sabbatico.

## MEMBRO DI ASSOCIAZIONI PROFESSIONALI

- Fellow of Royal Society of Chemistry (dal 2020)
- Membro della Società Fisica Italiana (Società Italiana di Fisica, da marzo 2021)
- Associate Fellow della Higher Education Academy (dal 2016).
- Membro dell'American Chemical Society (dal 2006 al 2020).
- Membro dell'American Association of Physical Teachers (2010).

## PARTECIPAZIONE A CONFERENZE INTERNAZIONALI

1. 10<sup>th</sup> International meeting on metabotropic glutamate receptors. 1-6 October 2021 Taormina Italy. **Poster contribution:** K. C. Weber, R. Ngomba, O. Mundell, D. Roccatano. *A Combined Docking and MD Simulations Study of Positive Allosteric Modulators Binding to mGlu5 7-TM Domain.*
2. Invited guest speaker at School of Computer Science of the University of East Anglia. 3rd February 2016. **Invited speaker.** Title: "*Study of Interaction Mechanisms of Block Copolymers with Biological Interfaces*".
3. Institute for Advanced Simulations at Juelich Forschungszentrum (Germany). Apr 24<sup>th</sup>, 2014. **Invited speaker.** Title: "*Biological molecules under non-natural conditions: A computer simulation prospective*".
4. CECAM workshop: "Biological molecules under non-natural conditions ". University of Stuttgart. March 10 to 12, 2014. **Invited Speaker.** Title: "*Structure, Dynamics and Function of the Monooxygenase P450 BM3: Insights from Atomistic Simulation studies*".
5. NanomeetsBio@Nanomates. University of Salerno. June 19<sup>th</sup> 2012. **Invited Speaker.** Title: "*Theoretical study of Nano-Structured Biopolymers using Molecular Dynamics Simulations*".
6. IUPAC MACRO 2012 World Polymer Congress, Blacksburg, USA. Extended abstract: G. Milano, A. De Nicola, S. Hezaveh, S. Samanta, T. Kawakatsu and **D. Roccatano.** Title: *Hybrid Particle-Field Models of Drug Nano-carriers based on Block-Copolymer Micelles.*
7. India-UK workshop on "Trends in protein biophysics: from in silico molecules to in vivo and vitro proteins". 17-19/5/2011. University of Warwick (UK). **Invited speaker.** Title: "*Structural and Dynamics Properties of Biopolymers in Solution: Insights from Molecular Dynamics Simulations and Fluorescence Spectroscopy*".
8. International CECAM-Workshop: "Spectroscopy and Quantum Phenomena in Large Molecular Aggregates". Bremen, June 27<sup>th</sup> - July 1<sup>st</sup>, 2011. **Poster.** K.Karki, D. Roccatano. "*Molecular dynamics simulations of pigment molecules*".
9. 10<sup>th</sup> ECONOS Conference. May 23-25, 2011. University of Twente (The Netherlands). **Poster.** K. Karki. A. Materny. D. Roccatano. "*Molecular dynamics simulation of pigment molecules*".
10. 25<sup>th</sup> Molecular Modelling Workshop, 4<sup>th</sup>-6<sup>th</sup> April, 2011. University of Erlangen-Nuremberg, Erlangen, Germany. **Poster:** S. Samanta, S. Hezaveh, G. Milano, D. Roccatano. "*Interaction of Polyethylene oxide and Polypropylene Oxide with Biological Surfaces*".
11. 10<sup>th</sup> International Symposium on Biocatalysis- Biotrans 2011, Sicily, Italy. **Two Posters:** R. Verma, U. Schwaneberg, D. Roccatano. "*MAP<sup>2.0</sup>3D: a structure based substitution spectra analyses of mutagenesis methods*". AJ Ruff, J. Marienhagen, R. Verma, D. Roccatano, H. Mundhada, AV. Shivange, U. Schwaneberg "*Ribavirin: A complementary universal base to P for Sequence Saturation Mutagenesis Method (SeSaM)*".

12. 5<sup>th</sup> International Congress on Biocatalysis- Biocat 2010, Hamburg, Germany. **Poster:** R. Verma, U. Schwaneberg, D. Roccatano. "MAP2.0: Evolution of Mutagenesis Assistant Program".
13. *International Congress on biocatalysis 2010*, Hamburg, Germany, 2010. 3 Poster presentations.
14. *Faraday Discussion 144: Multiscale Modelling of Soft Matter.*, Groningen, The Netherlands, July 20, 2009. 2 Poster presentations.
15. *International Congress on biocatalysis 2008*, Hamburg, Germany, August 31, 2008. **Poster:** D. Roccatano, T. S. Wong and U. Schwaneberg. *Mutagenesis Assistant Program (MAP): A bioinformatics tool for directed protein evolution.*
16. *50<sup>th</sup> Biophysical Society Annual Meeting*, Salt Lake City, Utah, February 18-22, 2006. Poster Presentation.
17. *M2CELL workshop: "From Macromolecules to the Cell"*, Royal Abbey of Fontevraud, France, December 4<sup>th</sup>, 2005. Poster Presentation.
18. Summer School (International University Bremen): *Biosensing with channels: faster, smaller, smarter* (30 July 2005). **Invited Speaker.**
19. *Classical and Quantum Dynamical Simulations in Chemical and Biological Physics International Workshop*, Dresden, June 6, 2005. **Speaker.**
20. *Workshop on Computer Simulation and Theory of Macromolecules*, Hünfeld, April 22, 2005. **Speaker.**
21. *Algorithms for Macromolecular Modelling IV*, Leicester, August 18, 2004. Poster Presentation.
22. Summer School (International University Bremen): *Advanced Modelling of Biological Function* (13 Aug. 2004). **Invited Speaker.**
23. *Third [i]lab Workshop on Chemical Biology. Molecules as Modulator: Systems Biology Challenges Chemistry*, Co-organized by Aventis and the University of Frankfurt, Erbach Monastery, Germany, January 29-31, 2004. Poster presentation.

## **ATTIVITÀ DI DIVULGAZIONE SCIENTIFICA**

### **SEMINARI**

**2017:** ARCHER Image Competition. Title: "*Pac-Enzyme in action: thermodynamics analysis of domain motion*" was selected for the 2017 ARCHER Calendar (September).

**2016:** Gravity Fields Festival, Grantham, UK, 22<sup>nd</sup> September 2016. Title: "*Exploring the Molecular Machines: A Fantastic Voyage.*"

**2015:** Christmas Lecturer at University of Lincoln, UK, 16th December 2015. Title: "*Exploring the Molecular Machines: A Fantastic Voyage.*"

**2007:** Interview for the Weser Kurier newspaper: "*Nicht nur für Waschmittel wichtig. Biotechnologen der Jacobs University erzeugen neue Enzyme für industrielle Zwecke*". **114**, 24, 18 May 2007.

### **SITI WEB**

- Dal 2021, il mio gruppo ha sviluppato uno strumento basato sul web chiamato MAP (Mutagenesis Assistant Program) per aiutare nella progettazione di esperimenti di ingegneria proteica. Questo strumento è stato utilizzato per esplorare le proprietà del codice genetico in relazione agli esperimenti di evoluzione diretta. La versione più recente del server (MAP<sub>2.0</sub><sup>3D</sup> : <http://smap.win.biotec.rwth-aachen.de> ) è attualmente ospitata presso la RWTH Aachen University a Aquisgrana in Germania.

- **Dal 2015** la pagina blog personale di WordPress ( <https://daniloroccatano.blog/> ) contiene 122 blog in lingua inglese, italiana e tedesca con contenuti di divulgazione didattica e scientifica su diversi argomenti scientifici. Il sito Web è stato visitato più di 60.000 volte dal 2015 con più di 1500 visualizzazioni al mese da 132 diverse nazioni in tutto il mondo negli ultimi due anni.
- **Instructables** è un sito web specializzato in tutorial creati e caricati dagli utenti per uso generale e per l'istruzione STEM nelle università, nelle scuole secondarie e primarie. È dedicato alla collaborazione passo dopo passo tra i membri per costruire una varietà di progetti. Dal 2021, Nella sua pagina personale su INSTRUCTABLES ( <https://www.instructables.com/member/DaniloR29/instructables/> ) Roccatano ha prodotto sei tutorial per la didattica STEM presso università, scuole secondarie e primarie. Finora ha ricevuto 10000 visualizzazioni e due prezzi.

## **ATTIVITÀ DIDATTICA**

L'attuale attività didattica e quella svolta in altre istituzioni è riassunta nel seguente elenco. Per ogni modulo è stato preparato tutto il materiale del corso che consiste nelle slides della presentazione per le lezioni, dispense con informazioni complementari, esercizi, esercitazioni di laboratorio ed esami. Un campione di questo materiale e il programma di ogni modulo possono essere forniti qualora richiesti per la documentazione.

- |                  |   |
|------------------|---|
|                  | <b>PRESSO L'UNIVERSITÀ DI LINCOLN (UK)</b>  |
| <b>Dal 2017</b>  | - Docente del modulo <i>MTH2008M Scientific Computing</i> per i corsi di laurea in fisica e matematica. Modulo annuale. Formato: lezioni teoriche ed esercitazioni pratiche di programmazione in C++ di laboratorio informatico       |
| <b>2016-2017</b> | - Docente del modulo <i>Physics Laboratory II</i> per il corso di laurea in fisica. Modulo annuale. Esperimenti pratici di laboratorio di studenti del secondo anno di fisica.  |
| <b>Dal 2016</b>  | - Docente del modulo <i>MTH2004M Differential Equations</i> per corsi di laurea in fisica e matematica. Modulo semestrale. Formato: lezioni frontali  |
| <b>Dal 2018</b>  | - Leader del modulo per il corso di laurea <i>MTH1004M Probability and Statistics. Nodulo</i> semestrale. Modulo di Laurea Magistrale in Matematica e Fisica. Formato: lezioni frontali + tutorial per computer in linguaggio Python. |
| <b>Dal 2016</b>  | - Partecipazione in forma di lezioni, seminari, progetti di studio in altri moduli del corso di laurea magistrale in matematica e in fisica.  |
| <b>Dal 2017</b>  | - Relatore di progetti di laurea triennale e magistrale.  |

- |                  |  |
|------------------|--|
|                  | <b>PRESSO L'UNIVERSITÀ JACOBS DI BREMA</b>   |
| <b>2010-2014</b> | - Docente per del modulo " <i>Advanced Physical Chemistry I</i> " del corso di Laurea Magistrale in Chimica. Corso completo. Formato: 28 lezioni.  |
|                  | - Docente del modulo " <i>Advanced Physical Chemistry Laboratory</i> " del corso di Laurea Magistrale in Chimica. Corso completo. Formato: 14 lezioni frontali ed esercitazioni di laboratorio, con progetto finale. |
|                  | - Docente del modulo " <i>Design of Biological Molecules and Systems II</i> " del corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Biochimica e Biotecnologie. Corso completo. Formato: 28 lezioni e ed                      |



- esercitazioni di laboratorio informatico.
- Docente del modulo "*Computational Chemistry and Biochemistry*" del corso di Laurea Magistrale in Chimica. Corso completo. Formato: 28 lezioni ed esercitazioni di laboratorio computazionale
- 2009**
- Docente per del modulo "*Advanced Physical Chemistry I*" del corso di Laurea Magistrale in Chimica. Corso completo. Formato: 28 lezioni.
  - Docente per del modulo "*Advanced Physical Chemistry II*" del corso di Laurea Magistrale in Chimica. Corso completo. Formato: 28 lezioni.
  - Docente del modulo "*Advanced Physical Chemistry Laboratory*" del corso di Laurea Magistrale in Chimica. Corso completo. Formato: 14 lezioni frontali ed esercitazioni di laboratorio, con progetto finale.
- 2008**
- Docente del modulo "*Computational Chemistry and Biochemistry*" del corso di Laurea Magistrale in Chimica. Corso completo. Formato: 28 lezioni ed esercitazioni di laboratorio informatico
  - Docente per del modulo "*Advanced Physical Chemistry II*" del corso di Laurea Magistrale in Chimica. Corso completo. Formato: 28 lezioni.
  - Docente per del modulo "*Structure and Mechanism of Organic reactions*" del corso di Laurea Magistrale in Chimica. Corso completo. Formato: 28 lezioni.
- 2007**
- Docente del modulo "*Computational Chemistry and Biochemistry*" del corso di Laurea Magistrale in Chimica. Corso completo. Formato: 28 lezioni ed esercitazioni di laboratorio informatico.
  - Docente del corso interdisciplinare per la Laurea magistrale "*Crime, Culture and Science*". Il corso è stato insegnato insieme alla collega Prof.ssa I. Amodeo (Professore di Lettere alla Jacobs University di Brema). Formato: 14 lezioni e seminari con relatori invitati.
  - Insegnamento del modulo "*Current Topics in Nanomolecular Science*" per il corso di laurea magistrale e di dottorato. Condiviso con altri colleghi.
  - Docente nel corso di laurea magistrale "*Nanomolecular Science Laboratory rotation*". Formato: progetto computazionale.
  - Docente del modulo "*Advanced Computational Methods for Nanomolecular Science*" del Corso di laurea magistrale e dottorato in chimica e nanotecnologie. Corso completo. Formato: 27 lezioni ed esercitazioni di laboratorio informatico.
- 2006**
- Docente del modulo "*From matter to molecules*" del Corso di laurea magistrale e dottorato in chimica e nanotecnologie. Formato: 7 lezioni sulla chimica quantistica di base.
  - Docente per del modulo "*Structure and Mechanism of Organic reactions*" del corso di Laurea Magistrale in Chimica. Corso completo. Formato: 28 lezioni.
  - Docente del modulo "*Computational Chemistry and Biochemistry*" del corso di Laurea Magistrale in Chimica. Corso completo. Formato: 28 lezioni ed esercitazioni di laboratorio informatico.
  - Docente del modulo "*Design of Biological Molecules and Systems II*" del corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Biochimica e Biotecnologie. Corso completo. Formato: 28 lezioni e ed esercitazioni di laboratorio informatico.
- 2005**
- Docente del modulo "*Computational Chemistry and Biochemistry*" del corso di Laurea Magistrale in Chimica. Corso completo. Formato: 28 lezioni ed esercitazioni di laboratorio computazionale
- 2004**
- Docente nel corso "*Advanced Bioinformatics Lab*". Lezioni su: *Introduction to Perl Programming for Bioinformatics with*

- 2004/2003** - *Laboratory Tutorials*. Formato: lezioni ed esercitazioni di laboratorio informatico.
- Docente del corso di Master in nanotecnologie "*Methods and Research Strategies in Life Science*". Lezioni sulla simulazione di dinamica molecolare delle biomolecole.
- 2003** - **NELLE UNIVERSITÀ ITALIANE**
- Lezioni sulle simulazioni di Dinamica Molecolare per il corso di "Bioinformatica", Università degli Studi di Roma "La Sapienza". In italiano .
- Lezioni sulle simulazioni di Dinamica Molecolare per il corso di *Chimica Computazionale* , Università degli Studi dell'Aquila. In italiano.
- Lezioni di Modellistica Molecolare in "Chimica Generale e Inorganica", Università degli Studi dell'Aquila. In italiano.
- 2002** - Esercitazioni pratiche per il corso di "Chimica Generale e Inorganica" per studenti universitari di chimica, biologia e fisica, Università degli studi dell'Aquila. In italiano.
- Lezioni di Modellistica Molecolare per il corso di "Chimica Farmaceutica" per il laureando in Chimica, Università degli Studi dell'Aquila. In italiano.

## ATTIVITA' DI SUPERVISIONE STUDENTI DI DOTTORATO

### Relatore di studenti di dottorato

1. Rajni Verma. (finanziata dai grant di ricerca BMBF molzyme/EU Oxygreen , 2009-2012). Data di discussione del dottorato di ricerca: 14/12/2012. Tesi: *"Sviluppo e applicazione di nuovi strumenti di bioinformatica e modellazione computazionale per l'ingegneria proteica"*.
2. Susruta Samanta. (sovvenzione DFG, 2009-2012). Data di discussione del dottorato di ricerca: 18/12/2012. Tesi: *Studio teorico dell'interazione di copolimeri a blocchi anfifilici con interfacce biologiche e piccole molecole*.
3. Samira Hezaveh. (finanziata dal DFG, 2009-2012). Data di discussione del dottorato di ricerca: 21/5/2012. Tesi: *Study of Interaction Mechanisms of Block Copolymers with Biological Interfaces*.
4. Khadga Karki. Data di discussione del dottorato di ricerca: 16/12/2011. Tesi: *Molecular Modeling and Investigation of Ultrafast Dynamics in Nanosystems*. Premiato con lode.

### Co-relatore di studenti di dottorato

1. Edita Sarukhanyan (PhD 2013). Tesi: *Multi-scale Simulation Studies of Interactions of Carbon Nanotubes with Biopolymers and Lipid Bilayer*. Dottorato di ricerca internazionale tra Università degli Studi di Salerno e Università Jacobs di Brema. Co-relatore con la Prof. G. Milano (Università degli Studi di Salerno, Italia).
2. Zhenwei Li (PhD2012). Tesi: *Directed subtilisin E evolution into a chaotolerant protease*. Co-supervisionato con il Prof U. Schwaneberg (RWTH Aachen University, Germania).
3. Amol Shivange (PhD 2010, con lode). Tesi: *Rational and Evolutive Reengineering of Phosphatase: from Method Development to Understanding of properties*. Co-relatore con il Prof U. Schwaneberg (RWTH Aachen University, Germania).
4. Ronny Martinezmoya (PhD 2010 con lode). Tesi: *Directed evolution of Bacillus gibsonii Alkaline Protease towards Washing Applications: A Study of Protein Adaptation*. Co-relatore con il Prof U. Schwaneberg (RWTH Aachen University, Germania).

5. Kan Lang Tee (PhD 2007 con lode). Tesi: *Directed evolution of P450 BM-3 for epoxidation of styrene and characterisation of tolerance towards ionic liquids*. Co-relatore con il Prof U. Schwaneberg (RWTH Aachen University, Germania).
6. Jovana Razor (PhD 2007). Tesi: *Alternative Cofactor Systems Driving P450 BM3*. Co-relatore con il Prof U. Schwaneberg (RWTH Aachen University, Germania).
7. TS Wong (PhD 2006, con lode). Tesi: *Expanding the toolbox of directed evolution for understanding protein structure-function relationships*. Co-relatore con il Prof U. Schwaneberg (RWTH Aachen University, Germania).

## **Membro esterno di esami di dottorato di ricerca**

**11. Luglio. 2022.** Università di Sheffield (Regno Unito). dottorato di ricerca studente: Sig. Melvin Mikuzi. Tesi: *Developing a cell surface display system for C. necator H16*. Dr Tuck Seng Wong (Università di Sheffield, Regno Unito).

**19. dicembre 2018.** Università di Sheffield (Regno Unito). dottorato di ricerca studente: Sig. Abdulrahman Hirab Ali Alessa. Tesi: *Protein Engineering of a Dye Decolorizing Peroxidase from Pleurotus ostreatus*. Relatore: Dr Tuck Seng Wong (Università di Sheffield, Regno Unito).

**17. settembre 2018.** Università di Sheffield (Regno Unito). dottorato di ricerca studente: Miss Inas Al - Nuaemi. Tesi: *Investigating the industrial application potentials of cytochrome P450BM-3 and four novel putative cytochrome P450s isolated from Cupriavidus necator H16*. Relatore: Dr Tuck Seng Wong (Università di Sheffield, Regno Unito).

**19. settembre 2014.** Universidad del Pas Vasco, Donostia San Sebastian (Spagna). Dottorando: Sig.na Caterina Bianchi. Tesi: *Molecular Dynamics Simulations of the Epigenetic Machinery*. Relatore: Prof Dr Ronen Zangi (Universidad del Pas Vasco, Spagna).

**7. Dic. 2012.** RWTH Aachen University, Aquisgrana (Germania). Dottorando: Sig. Zhenwei Li. Tesi: *Directed subtilisin E evolution into a chaotolerant protease*. Co-relatore con il Prof U. Schwaneberg (RWTH Aachen University, Germania).

**28. Ott. 2013.** Jacobs University Brema (Germania) e Università di Salerno (Italia). Dottorando: <sup>[SEP]</sup>Sayed Alireza Mousavi. *Randomized Network of Single Walled Carbon Nanotubes Thin Film Transistor: Fabrication, Simulation and Application as Biosensor*. Relatori: Prof Vincenzo Tucci (Università di Salerno, Italia) e Prof V. Wagner (Jacobs University Brema, Germania)

**9. Nov. 2012.** Jacobs University Brema (Germania). Dottorando: <sup>[SEP]</sup>Signorina Claudia Ley. Tesi: *Screening for artificial electron transfer to P450 BM3*. Relatore: Prof Dr Ulrich Schwaneberg (RWTH Aachen University, Germania).

**26. Luglio 2010.** Jacobs University Brema (Germania). Dottorando: <sup>[SEP]</sup>La signorina Ran Tu. Tesi: *Flow cytometry-based screening systems for directed evolution of proteases*. Relatore: Prof Dr Ulrich Schwaneberg (RWTH Aachen University, Germania).

**20. Agosto 2009.** Jacobs University Brema (Germania). Dottorando: <sup>[SEP]</sup>Signorina Saskia Maria Ihle . Tesi: *Advancing the Synthosome system towards industrial application: Introduction of trigger systems and enzyme quantification*. Relatore: Prof Dr Ulrich Schwaneberg (RWTH Aachen University, Germania).

**13. Gen. 2011.** Jacobs University Brema (Germania). Dottorando: <sup>[SEP]</sup>Signor Hemanshu Mundhada . Tesi: *Advancements of the Sequence Saturation Mutagenesis (SeSaM) Method to Efficiently Explore Protein Sequence Space*. Relatore: Prof Dr Ulrich Schwaneberg (RWTH Aachen University, Germania).

**13. Gen. 2011.** Jacobs University Brema (Germania). Dottorando:<sup>[1][2][3]</sup><sup>[SEP]</sup>Sig. Ronny Ernesto Martínez Moya. Tesi: *Directed Evolution of Bacillus gibsonii Alkaline Protease towards Washing Applications: a Study of Protein Adaptation*. Co-relatore con il Prof Dr Ulrich Schwaneberg (RWTH Aachen University, Germania).

**18 maggio 2009.** Jacobs University Brema (Germania). Dottorando:<sup>[1][2][3]</sup><sup>[SEP]</sup>Sig. Srinivasaraghavan Kannan. Tesi: *Applications of Advanced Sampling Methods for Enhanced Conformational Sampling of Biomolecules*. Relatore: Prof. Martin Zacharias (TUM University, Germania).

### **Altri studenti in co-supervisione**

- Dott.ssa Andrea Scacioc (durante il suo triennio di tirocinio presso la Sesam Biotech, 2009-2011).
- Dr Aamir Shehzad (con il Prof U. Schwaneberg RTWH Aachen, PhD in biotecnologia)
- Dr Alaa Othman (con il Prof U. Schwaneberg RTWH Aachen, durante il suo periodo di borsista per il progetto BMBF Bioindustry2021 (Molzylm)).

### **Tesi di laurea**

1. Ellis Page (BSc in matematica, 2022, Università di Lincoln, Regno Unito).
2. Jessica Norridge (BSc in matematica, 2022), Università di Lincoln, Regno Unito.
3. Silvana L. Lamb (BSc in matematica, 2022), University of Lincoln, Regno Unito.
4. Oluwadamilola Ajiboye (BSc in matematica, 2021), Università di Lincoln, Regno Unito.
5. George Lightfoot (BSc in matematica, 2021), Università di Lincoln, Regno Unito.
6. Jack Dandy (BSc in matematica, 2021), Università di Lincoln, Regno Unito.
7. Lezley A. Dawes (BSc in matematica, 2020), University of Lincoln, Regno Unito.
8. Andrew Tompkins (BSc in matematica, 2019), Università di Lincoln, Regno Unito.
9. Ruth Denham (BSc in matematica, 2019), Università di Lincoln, Regno Unito.
10. Shannon Woolis (BSc in matematica, 2018), Università di Lincoln, Regno Unito.
11. Eloise Bowden (BSc in matematica, 2018), Università di Lincoln, Regno Unito.
12. Y. Forjour (BSc in Biotecnologia 2007), Jacobs University Bremen, Germany.
13. Samuel Wilberforce (BSc in Biotecnologia 2006), Jacobs University Bremen, Germany.

### **Tesi magistrale**

1. Lauren Bartie (MSc in Matematica, 2022), Università di Lincoln, Regno Unito.
2. Kanchan Devkota (MSc in Biotecnologie, 2010), Jacobs University Bremen, Germany.
3. Upakul Deka (MSc in chimica, 2008), co-relatore con il Prof R. Richards (Colorado Mines University, USA), Jacobs University Bremen, Germany.
4. Mano Karaöse (MSc in chimica, 2009), co-relatore con il Prof N. Khunert, Jacobs University Bremen, Germany.
5. Kadgha Karki (MSc in fisica, 2007), co-relatore con il Prof A. Materny, Jacobs University Bremen, Germany.

### **Studenti in visita e tirocinanti**

#### **Programma di scambio di studenti dell'Università di Oxford/Jacobs University**

1. Oliver Crossley (Università di Oxford, Regno Unito), dal 24/6/2014 al 7/9/2014.

#### **Associazione internazionale per lo scambio di studenti per esperienza tecnica (IAESTE/DAAD) tedesco**

1. Dushyant Kshatriya (Institute of Chemical Technology Mumbai, India), dal 10/6/2014 al 24/7/2014.
2. Mojmir Mutni (Università di Edimburgo, Regno Unito), dal 26/7/2013 al 16/9/2013.
3. Thais Luiza Donega e Souza (Fundação Educacional do Município de Assis University): dal 15/6/2012 al 14/9/2012.
4. Justyna Lenda (Università di Cracovia), dal 1/7/2011 al 25/9/2011.

## **INCARICHI E RUOLI ISTITUZIONALI IN UNIVERSITÀ ITALIANE ED ESTERE E/O ISTITUZIONI PUBBLICHE E PRIVATE**

### **2014- oggi:**

Alla Scuola di Matematica e Fisica dell'Università di Lincoln

- Responsabile per l'amministrazione delle ammissioni di matricole.
- Coordinatore dei tutori degli studenti della Scuola.
- Promotore di collaborazioni di ricerca interscolastiche.
- Responsabile di dipartimento per l'ammissione degli studenti universitari.
- Tutore di studenti universitari e laureati.
- Membro del comitato interno per esame di tesi di laurea magistrali.

**2018 e 2022:** Membro esterno della commissione per l'esame di dottorato presso l'Università di Sheffield, Regno Unito.

**2014:** Membro esterno della commissione per l'esame di dottorato presso l'Università del Pas Vasco, Donostia, San Sebastian (Spagna).

**2012:** Membro esterno della commissione per l'esame di dottorato presso la RWTH Aachen University, Aquisgrana (Germania).

**2009-2013:** Coordinatore per l'Università Jacobs di Brema (Germania) del programma di dottorato internazionale congiunto in Scienze Nano-molecolari con l'Università degli Studi di Salerno (Italia). Il programma nasce come collaborazione internazionale tra l'Università degli Studi di Salerno (con coordinatore Prof G. Milano) e la Jacobs University a Brema.

**2005-2011:** Membro del comitato interno per l'esame finale per tesi magistrali e di dottorato di ricerca presso International/Jacobs University Brema.

**2007-2011:** Tutore degli studenti di laurea presso la International/Jacobs University a Brema (Germania).

**2002-2003:** Membro Comitato Organizzatore della primo e secondo workshop *Teoria e Simulazioni di sistemi Molecolari*, Gaeta, Italia.

## **ELENCO COMPLETO DELLE PUBBLICAZIONI**

L'attività di ricerca ha finora generato 92 articoli pubblicati su giornali scientifici (9 dei quali evidenziati in copertina), cinque capitoli di libri e due libri (tesi di laurea e dottorato). L'indice-H calcolato da Google Scholar è pari a 41 (in Agosto 2022) con un totale di ~5000 citazioni.

<https://scholar.google.com/citations?user=sMAH6VMAAAJ&hl=it>

IDENTIFICATORE ORCID: [0000-0002-8495-3815](https://orcid.org/0000-0002-8495-3815)

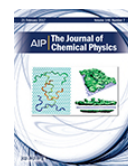
## ARTICOLI SU GIORNALI SCIENTIFICI

### 2021-22

1. M. Soloviev, G. Siligardi, **D. Roccatano**, E. Ferrari. *Adsorption of the RBD of the SARS-CoV-2 virus at the solid-liquid interface. J. of Colloid and Interface Science*, 605, 286-295, (2022).

### 2019-2017

2. **D. Roccatano** and S. Hayward. *Free Energy Profile of Domain Movement in Ligand-Free Citrate Synthase. J. Phys. Chem. B*, 123 (9), 1998–2004, (2019).
3. W. Ma, A. Saccardo, **D. Roccatano**, D. Aboagye-Mensah, M. Jewkes, F. Di Nezza, M. Soloviev, E. Ferrari. *Modular assembly of proteins on nanoparticles. Nature Communication*, 9(1), 1489, (2018).
4. **D. Roccatano**, E. Sarukhanyan, R. Zangi. *Adsorption Mechanism of an Antimicrobial Peptide to Single-Walled Carbon Nanotubes: A Molecular Dynamics Study. J. Chem. Phys.*, 146, 074703, (2017). **COVER PAGE.**



### 2016

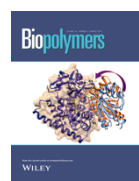
5. K. Karki, S. Samanta, **D. Roccatano**. *Molecular Properties of Astaxanthin in Water/Ethanol Solutions from Computer Simulations. J. Phys. Chem. B*, 120, 9322–9328, (2016).
6. R. Zangi and **D. Roccatano**. Strings-to-Rings Transition and Anti-parallel Dipole Alignment in Two-Dimensional Methanols. *Nano Lett.*, 16(5), 3142-7, (2016).
7. R. Verma, D. Holtmann, U. Schwaneberg, **D. Roccatano**. *Unravelling binding effects of Cobalt(II)-Sepulchrate with the Monooxygenase P450BM-3 Heme Domain using Molecular Dynamics Simulations. J. Chem. Theory Comput.*, 12 (1), 353-363, (2016).
8. A.V. Shivange, **D. Roccatano**, U. Schwaneberg. *Iterative key-residues interrogation of a phytase with thermostability increasing substitutions identified in directed evolution. Applied Microbiology and Biotechnology*, 100(1), 227-242, (2016).

### 2015

9. **D. Roccatano**. *Structure, dynamics, and function of the Monooxygenase P450 BM3: Insights from Computer Simulations Studies. Invited review. Journal of Physics: Condensed Matter*. 7, 273102, (2015). **Invited review.**
10. E. Sarukhanyan, G. Milano, **D. Roccatano**. *Cosolvent, Ions and Temperature Effects on the Structural Properties of Cecropin A- Magainin 2 Hybrid Peptide in Solutions. Biopolymers*, 103(1), 1-14, (2015).

### 2014

11. E. Sarukhanyan, A. De Nicola, **D. Roccatano**, T. Kawakatsu, G. Milano. *Spontaneous Insertion of Carbon Nanotube Bundles inside Biomembranes: a Hybrid Particle-Field Coarse-Grained Molecular Dynamics Study. Chem. Phys. Lett.* 595, 156–166, (2014).
12. E. Sarukhanyan, G. Milano, **D. Roccatano**. *Coating Mechanisms of Single-Walled Carbon Nanotube by Linear Polyether Surfactants: Insights from Computer Simulations. J. Phys. Chem. C*. 118 (31), 18069–18078, (2014).
13. A. De Nicola, Y. Zhao, T. Kawakatsu, S. Hezaveh, **D. Roccatano**, G. Milano. *Micellar Drug Nanocarriers and Biomembranes: How do they interact? PCCP*. 16(11), 5093-5105, (2014).
14. R. Verma, U. Schwaneberg, **D. Roccatano**. *Insight into the redox partner interaction mechanism in cytochrome P450BM-3 using molecular dynamics simulations. Biopolymers*. 101(3), 197-209, (2014). **COVER PAGE.**
15. Z. Li, **D. Roccatano**, M. Lorenz, R. Martinez, U. Schwaneberg. *Insights on activity and stability*



of subtilisin E towards guanidinium chloride and sodium dodecyl sulfate. *Journal of biotechnology*. 169, 87–94, (2014).

## 2013

16. S. Samanta, S. Hezaveh, and **D. Roccatano**. *Theoretical Study of Binding and Permeation of Ether-Based Polymers through Interfaces*. *J. Phys. Chem. B*. 117 (47), 14723–14731, (2013).
17. A. Shehzad, S. Panneerselvam, M. Linow, M. Bocla, **D. Roccatano**, J. Mueller-Dieckmann, M. Wilmanns, U. Schwaneberg. *P450 BM3 crystal structures reveal the role of the charged surface residue Lys/Arg184 in the inversion of enantioselective styrene epoxidation*. *Chem. Commun.* 49, 4694–4696, (2013).
18. S. Samanta, **D. Roccatano**. *Interaction of Curcumin with PEO-PPO-PEO block copolymers: A molecular dynamics study*. *J. Phys. Chem. B*, 117(11), 3250–3257 (2013).
19. S. Z. Cekić, A. Magnusson, U. Schwaneberg, **D. Roccatano**, J. Schrader, D. Holtmann. *A computational protocol to predict suitable redox mediators for substitution of NAD(P)H in P450 monooxygenases*. *J. Catalysis B*. 88, 47–51, (2013).
20. R. Verma, U. Schwaneberg, **D. Roccatano**. *Conformational Dynamics of the FMN-Binding Reductase Domain of Monooxygenase P450BM-3*. *JCTC*, 9(1), 96–105, (2013).

## 2012

21. R. Verma, U. Schwaneberg, **D. Roccatano**. *Computer-aided directed protein evolution: a review of server, database, and tools for protein engineering*. *Computational and Structural Biotechnology Journal*. 2(3), e201209008, (2012). **Invited review**.
22. S. Hezaveh, A. De Nicola, G. Milano, **D. Roccatano**. *Understanding the Interaction of Block Copolymers with DMPC Lipid Bilayer Using Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations*. *J. Phys. Chem B*. 116(49), 14333–14345, (2012).
23. A. J. Ruff, J. Marienhagen, R. Verma, **D. Roccatano**, H.-G. Genieser, P. Niemann, A.V. Shivange, U. Schwaneberg. *dRTP and dPTP complementary nucleotide couples for Sequence Saturation Mutagenesis (SeSaM)*. *J. Mol. Cat. B: Enzymatic*. 84, 40–47, (2012).
24. J. Kuper, K.L. Tee, M. Wilmanns, **D. Roccatano**, U. Schwaneberg, T. S. Wong. *The role of active site Phe87 in modulating the organic cosolvent tolerance of cytochrome P450 BM3 monooxygenase*. *Acta Crystallographica Section F*. F68, 1013–1017, (2012).
25. K. Karki, D. Gabel, **D. Roccatano**. *A water solvation model of dodecaborate clusters*. *Inorg. Chem.* 51(9), 4894–4896 (2012).
26. R. Verma, U. Schwaneberg, **D. Roccatano**. *MAP<sup>2.0</sup>3D: A Sequence/Structure-Based Server for Protein Engineering*. *ACS Synthetic Biology*. 1(4), 139, (2012).
27. Z. Li, **D. Roccatano**, M. Lorenz, U. Schwaneberg. *Directed evolution of subtilisin E into a chaophilic protease with high activity and stability in guanidinium chloride and SDS*. *ChemBioChem*. 13(5), 691, (2012).
28. S. Hezaveh, S. Samanta, G. Milano, **D. Roccatano**. *Molecular dynamics simulation study of solvent effects on conformation and dynamics of polyethylene oxide and polypropylene oxide chains in water and common organic solvents*. *J. Chem. Phys.* 136, 124901 (2012).
29. S. Samanta, S. Hezaveh, G. Milano, **D. Roccatano**. *Diffusion of 1,2-Dimethoxyethane and 1,2-Dimethoxypropane through Phosphatidylcholine Bilayers: A Molecular Dynamics Study*. *J. Phys. Chem. B*, 116(17), pp 5141–5151 (2012). **COVER PAGE**. Correction *J. Phys. Chem. B*, 116(30), 9286–9286, (2012).
30. De Nicola, Y. Zhao, T. Kawakatsu, **D. Roccatano** and G. Milano. *Validation of a Hybrid Particle-Field Coarse-Grained Model for DPPC in Non-Lamellar Phases*. *Theo. Chem. Acta*. 131, 1167 (2012).





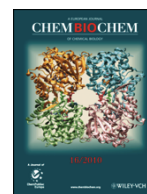
## 2011

31. S. Hezaveh, S. Samanta, G. Milano, **D. Roccatano**. *Structure and dynamics of 1,2-dimethoxyethane and 1,2-dimethoxypropane in aqueous and non-aqueous solutions: A molecular dynamics study*. *J. Chem. Phys.*, **135**, 164501, (2011). **COVER PAGE**.
32. A. De Nicola, Y. Zhao, T. Kawakatsu, **D. Roccatano** and G. Milano. *Hybrid Particle-Field Coarse-Grained Models for Biological Phospholipids*. *J. Chem. Theory Comput.*, **7**(9), 2947–2962 (2011).
33. A.V. Shivange, A. Serwe, A. Denning, **D. Roccatano**, S. Haefner, and U. Schwaneberg. *Directed evolution of Yersinia mollahareetii phytase*. *Applied Microbiology and Biotechnology*. **95** (2), 405-418 (2011).
34. K. Karki, A. Materny, **D. Roccatano**. *Study of structural and dynamic properties of liquid phenyltrimethoxysilane*. *PCCP*, **13**, 11864-11871, (2011).
35. H. Mundhada, J. Marienhagen, A. Scacioc, A. Schenk, **D. Roccatano**, U. Schwaneberg. *SeSaM-Tv-II generates a protein sequence space which is unobtainable by epPCR*. *ChemBioChem* (2011), **12** (10), 1595-1601, (2011).
36. R. Martinez, U. Schwaneberg, **D. Roccatano**. *Temperature Effects on Dynamics of Psychrophilic Protease S41 and its Thermostable Mutants in Solution*. *Protein Eng. Des. Sel.*, **24**, 533-544, (2011).
37. K.Karki and **D. Roccatano**. *Molecular Dynamics Simulation Study of Chlorophyll a in Different Organic Solvents*. *J. Chem. Theory Comput.*, **7**(4), 1131–1140, (2011).



## 2010/2009

38. L. Zhu, R. Verma, **D. Roccatano**, Y. Ni, Z.-H. Sun, U. Schwaneberg. *A Potential Antitumor Drug (Arginine Deiminase) Reengineered for Efficient Operation under Physiological Conditions*. *ChemBioChem* **11** (5), 691–697, (2010). **COVER PAGE**.
39. L. Zhu, K. L. Tee, **D. Roccatano**, B. Sonmez, Y. Ni, Z.-H. Sun, U. Schwaneberg. *Directed evolution of a potential anti-tumor drug (arginine deiminase) for increased activity at physiological pH*. *ChemBioChem* **11** (5), 691–697, (2010).
40. A.V. Shivange, U. Schwaneberg, **D. Roccatano**. *Conformational dynamics of active site loop in Escherichia coli phytase*. *Biopolymers*. **93**(11), 994–1002, (2010). **COVER PAGE**.



## 2008

41. **D. Roccatano**. *Computer Simulations Study of Biomolecules in Non-Aqueous or Cosolvent/Water Mixture Solutions*. *Current Peptide and Peptide Science*. **9**(4), 407-426, (2008). **Invited review**.
42. O. Onaca, P. Sarkar, **D. Roccatano**, T. Friedrich, B. Hauer, M. Grzelakowski, A. Gueven, M. Fioroni, U. Schwaneberg. *Functionalised nano compartments (Synthosomes) with a reduction-triggered system*. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **47**(37), 7029-7031, (2008).
43. J. Nazor, S. Dannennmann, R. Obeg Adjei, Y. B. Fordjour, T. I. Ghampson, M. Blanus, **D. Roccatano**, U. Schwaneberg. *Laboratory evolution of P450 BM3 for mediated electron transfer yields and activity-improved & reductase-independent variant*. *Protein Eng. Des. Sel.*, **21**(1), 29-35, (2008).
44. K. L. Tee, **D. Roccatano**, S. Stolte, J. Arning, B. Jastorff, U. Schwaneberg. *Ionic liquid as cosolvent for biotransformation catalysed by P450 BM-3*. *Green Chem.*, **10**, 117-123, (2008).
45. T. S. Wong, **D. Roccatano**, K. L. Tee, A. Schrenk, M. Breuer, B. Hauer, U. Schwaneberg. *Transversion-enriched sequence saturation mutagenesis (SeSaM-Tv+): A random mutagenesis method with consecutive nucleotide exchanges that complements the bias of error-prone PCR*. *Biotechnology Journal*, **3**(1), 74-82, (2008).

## 2007

46. T. S. Wong, **Danilo Roccatano**, U. Schwaneberg. *Are transversion mutations better? A*

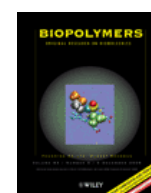


*Mutagenesis Assistant Program analysis on P450 BM-3 heme domain.* Biotechnology Journal, **2**, 133-142 (2007).

47. J. Kuper, T. S. Wong, **D. Roccatano** M. Wilmanns, U. Schwaneberg. *Understanding the mechanism of organic cosolvent inactivation in heme monooxygenase P450 BM-3* JACS, **129**, 5786-5787 (2007).
48. **D. Roccatano**, A. Barthel, M. Zacharias. *Structural flexibility of the nucleosome core particle at atomic resolution studied by molecular dynamics simulations.* Biopolymers, **85**, 401-421, (2007).
49. **D. Roccatano**, H. Sahoo, M. Zacharias, W. M. Nau. *Temperature dependence of looping rates in a short peptide* J. Chem. Phys B, **111**, 2639-2646 (2007).
50. H. Sahoo, **D. Roccatano**, A. Henning and W. M. Nau. *A 10 Å spectroscopic ruler applied to short polyprolines.* JACS, **129**, 9762-9772 (2007).
51. T. S. Wong, **D. Roccatano**, U. Schwaneberg. *Steering directed protein evolution: strategies to manage combinatorial complexity of mutant libraries.*, Environmental Microbiology, **9(11)**, 2645-2659, (2007). **Review.**
52. T. S. Wong, **D. Roccatano**, U. Schwaneberg. *Challenges of the genetic code for exploring sequence space in directed protein evolution.* Biocatalysis and Biotransformation, **25(2-4)**, 229-241, (2007). **Review.**

## 2006

1. T. S. Wong, **D. Roccatano**, M. Zacharias, U. Schwaneberg. *A statistical analysis of current random mutagenesis methods for directed protein evolution.* J. Mol. Biol., **355**, 858-871 (2006). **COVER PAGE.**
2. A. Schenk, T. S. Wong, **D. Roccatano**, B. Hauer, U. Schwaneberg. *SeSaM (Sequence Saturation Mutagenesis): Eine Methode zur Sättigungsmutagenese eines Genes.* Biospectrum, **3**, 277-279(2006).
3. S. Pal, G. Milano, **D. Roccatano**. *Synthetic polymers and biomembranes. How do they interact? Atomistic molecular dynamics simulation study of PEO in contact with DMPC lipid bilayer.* J. Phys. Chem. B., **110**, 26170-26179 (2006).
4. H. Sahoo, **D. Roccatano**, M. Zacharias, W. M. Nau. *Distance distributions of short polypeptides recovered by fluorescence resonance energy transfer in the 10 Å Domain.* JACS, **128**, 8118-8119 (2006).
5. **D. Roccatano**, T. S. Wong, U. Schwaneberg, M. Zacharias. *Toward understanding the inactivation mechanism of monooxygenase P450 BM-3 by organic cosolvents: a molecular dynamics simulation study.*, Biopolymers, **83**, 467-476 (2006). **COVER PAGE.**

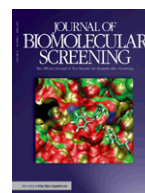


## 2005

53. M. D'Abramo, M. D'Alessandro, A. Di Nola, **D. Roccatano**, A. Amadei. *Characterisation of liquid behavior by means of local density fluctuations.* J. Mol. Liq., **117**, 17-21 (2005).
54. C. Di Teodoro, M. Aschi, A. Amadei, **D. Roccatano**, F. Malatesta, L. Ottaviano. *Conformational and electronic properties of a microperoxidase in aqueous solution: A computational study.* ChemPhysChem, **6**, 681-689 (2005).
55. S. Pal, **D. Roccatano**, H. Weiss, H. Keller, F. Müller-Plathe. *Molecular dynamics simulation of water near structured hydrophobic surfaces: interfacial energies.* ChemPhysChem, **6**, 1641-1649, (2005).
56. **D. Roccatano**, T. S. Wong, U. Schwaneberg, M. Zacharias. *Structural and dynamical properties of cytochrome P450 BM3 in pure water and DMSO/water mixture.* Biopolymers, **78**, 259-267 (2005).
57. **D. Roccatano**, G. Sbardella, M. Aschi, G. Amicosante, C. Bossa, A. Di Nola, F. Mazza. *Dynamical*

aspect of TEM-1  $\beta$ -lactamase. J. Comp. Aided Mol. Des., **19**, 329-340 (2005).

58. **D. Roccatano**, M. Fioroni, G. Colombo, M. Zacharias. *Effect of hexafluoroisopropanol alcohol on the structure of melittin: a molecular dynamics simulation study*. Prot. Sci., **14**, 2582-2589 (2005).
59. T. S. Wong, N. Wu, **D. Roccatano**, M. Zacharias and U. Schwaneberg. *A sensitive assay for laboratory evolution of hydroxylases toward aromatic and heterocyclic compounds*. J. Biomol. Screen, **10**, 246-252 (2005). **COVER PAGE**.



## 2004

60. C. Bossa, M. Anselmi, **D. Roccatano**, A. Amadei, B. Vallone, M. Brunori, A. Di Nola. *Extended molecular dynamics simulation of the carbon monoxide migration in sperm whale myoglobin*. Bioph. J., **86**, 3855-3862 (2004).
61. V. M. Coiro, A. Di Nola, M. A. Vanoni, M. Aschi, A. Coda, **D. Roccatano**. *Molecular dynamics simulation of interactions between the complexiron-sulfurr flavoprotein glutamate synthase and its substrates*. Prot. Sci., **13**, 2979-2991 (2004).
62. I. Daidone, F. Simona, **D. Roccatano**, R. A. Broglia, G. Tiana, G. Colombo, A. Di Nola.  *$\beta$ -hairpin conformation of fibrillogenic peptides: structure and  $\alpha/\beta$  transition revealed by molecular dynamics simulations*. PROTEINS: Struct., Funct., and Bioinf., **57**, 198-204 (2004).
63. I. Daidone, **D. Roccatano**, S. Hayward. *Investigating the accessibility of the closed and open domain conformations of citrate synthase using essential dynamics sampling*. J. Mol. Biol., **339**, 515-525 (2004).
64. **D. Roccatano**, A. Di Nola, A. Amadei. *A theoretical model for the folding/unfolding thermodynamics of single-domain proteins, based on the quasi-Gaussian entropy theory*. J. Phys. Chem. B, **108**, 5756-5762 (2004).
65. **D. Roccatano**, W. M. Nau, M. Zacharias. *Structural and dynamical properties of CAGQW peptide in water: a molecular dynamics simulation study using different force fields*. J. Phys. Chem. B, **118**, 18734-18742 (2004).

## 2003

66. G. Colombo, G. M. S. De Mori, **D. Roccatano**. *The interplay between hydrophobic cluster and loop propensity in  $\beta$ -hairpin formation: a mechanistic study*. Prot. Sci., **12**, 538-550 (2003).
67. I. Daidone, **D. Roccatano**, A. Amadei, A. Di Nola. *Molecular dynamics simulation of protein folding by essential dynamics sampling: the folding landscape of horse heart cytochrome c*. Bioph. J., **85**, 2865-2871 (2003).
68. M. Fioroni, K. Burger, A. E. Mark, **D. Roccatano**. *The influence of trifluoromethyl groups on the miscibility of fluorinated alcohols with water: a molecular dynamics simulation study of 1,1,1-trifluoro-propan-2-ol and its aqueous solution*. J. Phys. Chem. B, **107**, 4855-4861 (2003).
69. M. Fioroni, K. Burger, **D. Roccatano**. *Chiral discrimination in 1,1,1-trifluoro-propan-2-ol: a molecular dynamics study*. J. Chem. Phys., **119**, 1-8 (2003).
70. M. F. Gerini, **D. Roccatano**, E. Baciocchi, A. Di Nola. *Molecular dynamics simulation of lignin peroxidase*. Bioph. J., **84**, 3883-3893 (2003).
71. **D. Roccatano**, I. Daidone, M. A. Ceruso, C. Bossa, A. Di Nola. *Selective excitation of native fluctuations during thermal unfolding simulations: horse heart cytochrome c as a case study*. Bioph. J., **84**, 1876-1883 (2003).

## 2002

72. M. Aschi, **D. Roccatano**, A. Di Nola, C. Gallina, E. Gavuzzo, G. Pochetti, M. Pieper, H. Tschesche, F. Mazza. *Computational study of the catalytic domain of human neutrophil collagenase. Specific role of the S and S' subsites in the interaction with a phosphonate inhibitor*. J. Comp. Aided Mol.

Des., **16**, 213-225 (2002).

73. G. Colombo, **D. Roccatano**, A. E. Mark. *Folding and stability of the three-stranded  $\beta$ -sheet peptide betanova: Insights from molecular dynamics simulations*. Proteins: Struct., Funct., Genet., **46**, 380-392 (2002).
74. **D. Roccatano**, G. Colombo, M. Fioroni, A. E. Mark. *Mechanism by which 2,2,2-trifluoroethanol/water mixtures stabilise secondary structure formation in peptides: A molecular dynamics study*. Proc. Natl. Acad. Sci., **99**, 12179-12184 (2002).

## 2001-2000

75. M. Fioroni, K. Burger, A. E. Mark, **D. Roccatano**. *Model of 1,1,1,3,3,3-hexafluoro-propan-2-ol for molecular dynamics simulations*. J. Phys. Chem. B, **105**, 10967-10975 (2001).
76. **D. Roccatano**, A. E. Mark, S. Hayward. *Investigation of the mechanism of domain closure in citrate synthase by molecular dynamics simulation*. J. Mol. Biol., **310**, 1039-1053 (2001).
77. M. Fioroni, K. Bruger, A. E. Mark, **D. Roccatano**. *A new 2,2,2-trifluoroethanol model for molecular dynamics simulations*. J. Phys. Chem. B, **104**, 12347-12354 (2000).

## 1999

78. M. Mangoni, **D. Roccatano**, A. Di Nola. *Docking of flexible ligands to flexible receptors in solution by molecular dynamics simulations*. Proteins: Struct., Funct., Genet., **35**, 153-162 (1999).
79. **D. Roccatano**, A. Amadei, A. Di Nola, H. J. C. Berendsen. *A molecular dynamics study of the 41-56  $\beta$ -hairpin from B1 domain of Protein G*. Protein Sci., **8**, 2130-2143 (1999).

## 1998

80. **D. Roccatano**, R. Bizzarri, G. Chillemi, N. Sanna, A. Di Nola. *Development of a parallel molecular dynamics code on SIMD computers: An algorithm for the use of the pair list criterion*. J. Comp. Chem., **19**, 685-694 (1998).
81. **D. Roccatano**, A. Amadei, M. E. F. Apol, A. Di Nola, H. J. C. Berendsen. *Application of the quasi-Gaussian entropy theory to molecular dynamics simulations of Lennard-Jones fluids*. J. Chem. Phys., **109**, 6358-6363 (1998).
82. **D. Roccatano**, H. J. C. Berendsen, P. D'Angelo. *Assessment of the validity of intermolecular potential models used in molecular dynamics simulations by extended X-ray absorption fine structure spectroscopy: A case study of Sr in methanol solution*. J. Chem. Phys., **108**, 9487-9497 (1998).

## 1996

83. A. Amadei, **D. Roccatano**, M. E. F. Apol, H. J. C. Berendsen, A. Di Nola. *Prediction of the liquid-vapour equilibrium pressure using the Quasi-Gaussian entropy theory*. J. Chem. Phys., **105**, 7022-7025 (1996).
84. P. D'Angelo, N. V. Pavel, H. F. Nolting, **D. Roccatano**. *Multielectron excitations at the L-edges of barium in aqueous solution*. Phys. Rev. B, **54**, 12129-12138 (1996).

## 1995-1994

85. A. Di Nola, E. Gavuzzo, F. Mazza, G. Pochetti, **D. Roccatano**. *Internal  $\beta$ -turn hydration: crystallographic evidence and molecular dynamics simulation*. J. Phys. Chem., **99**, 9625-9631 (1995).
86. P. D'Angelo, A. Di Nola, A. Filipponi, N. V. Pavel, **D. Roccatano**. *An extended X-ray absorption fine structure study of aqueous solutions*. J. Chem. Phys., **100**, 985-994 (1994).

87. A. Di Nola, **D. Roccatano**, H. J. C. Berendsen. *Molecular dynamics simulation of the docking of substrates to proteins*. Proteins: Struct., Funct., Genet., **19**, 174-182 (1994).

## CAPITOLI IN VOLUME

1. D. Roccatano, *The Molecular Dynamics Simulation of Peptides on Gold Nano-surfaces*. Book chapter in Nanoparticles in Biology and Medicine. Ferrari E. and Soloviev M. (Eds.). 2020. Springer Science+Business Media, LLC, Second edition.
2. **D. Roccatano**. *A short Introduction to the Molecular Dynamics Simulation of Nanomaterials*. Book chapter in Micro and Nanomanufacturing, second edition. Editors: W. Ahmed and M. J. Jackson. 2017. Springer.
3. R. Verma, U. Schwaneberg, **D. Roccatano**. *The Mutagenesis Assistant Program*. Methods in Molecular Biology. E. Gillam, D. Ackerley and J. Copp Eds., Springer Protocols, Humana Press (2014).
4. **D. Roccatano**. *Computer simulations study of biomolecules in non-aqueous solutions*. Invited book chapter in Advances in Protein and Peptide Sciences. (2013), Vol. 1, Ed. Ben M. Dunn. Bentham Science Publisher.
5. **D. Roccatano**. *Theoretical Study of Nanostructured Biopolymers using Molecular Dynamics Simulations: a Practical Introduction*. Book chapter in "Nanostructured Soft Matter: Experiment, Theory, Simulation and Perspectives". Edited by A. V Zvelindovsky. Springer monograph (2007).

## TESI

1. **D. Roccatano**. *Studio di sistemi molecolari complessi mediante l'uso di tecniche avanzate di Dinamica Molecolare. Tesi di dottorato (in Italiano)*: Advisor: Prof A. Di Nola, University of Rome "La Sapienza", 1998.
2. **D. Roccatano**. *Determinazione della struttura dello Cu(II) aquatrisimidazolo solfato mediante dinamica molecolare e spettroscopia XANES. Tesi di Laurea (in Italiano)*. Advisors: Prof A. Di Nola and Prof M. Barteri, University of Rome "La Sapienza", Italy, 1992.

## ATTI DI CONVEGNI

1. C. Bossa, M. A. Ceruso, R. Spezia, V. M. Coiro, **D. Roccatano**, A. Di Nola. *Opening and closure of flaps in HIV-1 protease. A flip-flap mechanism suggested by molecular dynamics simulations*. Ital. J. Biochem., **52**, 91 (2002).
2. F. Mazza, G. Amicosante, M. Aschi, **D. Roccatano**. *Molecular dynamics simulations of the  $\beta$ -lactamase TEM-1*. Ital. J. Biochem., **52**, 109 (2002).
3. **D. Roccatano**, A. Amadei, A. Di Nola, H. J. C Berendsen. *Study of a  $\beta$ -hairpin forming peptide in aqueous solution using molecular dynamics simulations*. Journal of Bioscience, **24/S1**, 49 (1999).
4. M. Mangoni, **D. Roccatano**, A. Di Nola. *Docking of flexible ligands to flexible receptors in solution by molecular dynamics simulations*. Journal of Bioscience, **24/S1**, 69 (1999).

## TESTI DEPOSITATE IN ARCHIVI ONLINE

**D. Roccatano**. *La simulazione di dinamica molecolare (in italiano)*.  
[https://www.researchgate.net/publication/319979481\\_LA\\_SIMULAZIONE\\_DI\\_DINAMICA\\_MOLECOLARE](https://www.researchgate.net/publication/319979481_LA_SIMULAZIONE_DI_DINAMICA_MOLECOLARE)

## ARTICOLI ON LINE DI DIVULGAZIONE TECNICA E SCIENTIFICA

- La pagina personale del blog di WordPress ( <https://daniloroccatano.blog/> ) contiene 122 articoli in lingua inglese, italiana e tedesca con contenuti didattici e divulgativi su diversi argomenti scientifici. Il sito Web è stato visitato più di 65.000 volte dal 2015 da più di 47000 visitatori da 132 diverse nazioni in tutto il mondo.
- **INSTRUCTABLES** è un sito americano che ospita una comunità molto attiva di *makers*, specializzato in tutorials creativi di varia natura scritti dagli utenti del sito per uso personale o per l'istruzione tecnica e scientifica in università e nelle scuole secondarie e primarie. Ogni progetto è corredato da istruzioni passo-passo per costruirlo e gli altri utenti possono valutare la qualità o fornire suggerimenti per migliorarli tramite commenti. La pagina personale di Roccatano su questo sito

<https://www.instructables.com/member/DaniloR29/instructables/>

contiene nove progetti che possono essere adattati per attività didattiche di laboratorio per università, scuole secondarie o primarie. Finora ha ricevuto 13000 visualizzazioni e due premi.

## ARTICOLI IN PREPARAZIONE

1. K. C. Weber, R. Ngomba<sup>b</sup>, O. Mundell, **D. Roccatano**. A Steered Molecular Dynamics Simulations Study of Allosteric Modulators Binding to mGlu5 7-TM Domain.
2. **D. Roccatano**. *A Molecular Dynamics Study of the Preferential Binding of  $PW_{12}O_{40}^{3-}$  Anion to COVID-19  $M^{PRO}$  Protease*
3. **D. Roccatano and S. Hayward**. *Investigating Cross-units Cooperative Dynamics in Citrate Synthase. In preparation.*
4. **D. Roccatano**. *Alkyl-sulfates Chain Length Effects on the Preferential Solvation of Subsylin E.*
5. **D. Roccatano**. *Study of Glycine and Serine based Peptides in Solution using Molecular Dynamics Simulations*

Data

7/9/2022

Luogo

Lincoln, Regno Unito

