

## **Adriana Pietropaolo**

Ricercatore Universitario Confermato, Università degli Studi "Magna Græcia" di Catanzaro

### **Curriculum Vitae**

#### Carriera Accademica

- Conseguimento dell'Abilitazione Scientifica Nazionale a Professore di II fascia nell'SSD 03/B1-Fondamenti delle Scienze Chimiche e dei Sistemi Inorganici dal 12-04-2017 al 12-04-2026.
- Periodo di ricerca post-dottorale presso l'ETH-Zürich (01-04-2008 al 31-03-2010).
- Assegno di ricerca per il settore scientifico disciplinare CHIM/03 relativo al programma di ricerca "Aspetti computazionali di "folding" e aggregazione proteica" (2 assegni di ricerca, dal 01-04-2008 al 01-11-2010).
- Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche conseguito presso l'Università degli Studi di Bologna (XX ciclo).
- Abilitazione alla professione di chimico presso l'Università degli Studi di Catania.
- Diploma di Licenza della Scuola Superiore di Catania con votazione 70/70 e Lode.
- Laurea in Chimica conseguita con votazione 110/110 e Lode (Prima sessione 2004).
- Ammissione alla Scuola Superiore di Catania, Classe delle Scienze Sperimentali, A.A. 1999/2000.

#### Pubblicazioni Scientifiche su riviste internazionali mediante *peer-review* (al 13/10/2020):

46 articoli *peer-reviewed*, 2 capitoli di libri.

#### Formale attribuzione di incarichi di insegnamento o di ricerca (fellowship) presso qualificati atenei e istituti di ricerca esteri o sovranazionali.

- Incarico di insegnamento presso il Catalysis Research Center - Hokkaido University. Ciclo di lezioni "Introduction to Computational Chemistry" presso il Catalysis Research Center e ciclo di seminari presso la Nagoya University (Prof. Heiji Yashima), la Kyoto University (Prof. Yoshiki Chujo) e il Tokyo Institute of Technology (Prof. Toshikazu Takata) dal 27-08-2012 al 13-09-2012.
- Incarico di ricerca in qualità di "Project Assistant Professor" presso il Catalysis Research Center - Hokkaido University dal 04-08-2013 al 17-09-2013.
- Incarico di ricerca (fellowship) finanziato dal programma di mobilità "Marco Polo" presso il Chemistry Research Laboratory - University of Oxford dal 14-12-2006 al 21-04-2007.
- Incarico di ricerca (fellowship) finanziato dal programma HPC-Europa2 presso il Forschungszentrum Jülich - German Research School for simulation Sciences dal 30-01-2011 al 19-02-2011.
- Incarico di ricerca (fellowship) finanziata attraverso il programma "Heiwa Nakajima Foundation" presso il Catalysis Research Center - Hokkaido University dal 20-07-2012 al 07-09-2012.

### Formale attribuzione di incarichi di insegnamento

- Incarico di insegnamento di Chimica Generale e Inorganica presso il Corso di Laurea in farmacia dell'Università Magna Græcia di Catanzaro
  - A.A 2020-2021 (11 CFU);
  - A.A 2019-2020 (11 CFU);
  - A.A. 2018-2019 (11 CFU);
  - A.A. 2017-2018 (11 CFU);
  - A.A. 2016-2017 (11 CFU);
  - A.A. 2015-2016(11 CFU);
  - A.A. 2014-2015 (11 CFU);
  - A.A. 2013-2014 (11 CFU);
  - A.A. 2012-2013 (11 CFU);
  - A.A. 2011-2012 (11 CFU);
  - A.A. 2010-2011 (11 CFU).
- Incarico di insegnamento di Elementi di Chimica Bioinorganica presso il programma di dottorato in "Life Sciences and Technologies" dell'Università Magna Græcia di Catanzaro
  - A.A. 2017-2018 (2 CFU);
  - A.A. 2018-2019 (1 CFU).

### Organizzazione o partecipazione a conferenze (selezionate):

- "Meeting on Advances and challenges in nanomedicine (Virtual)" 23-06-2020. "Multiscale Modeling and Design of Light Responsive Soft Nanosystems", Ruolo: relatore (**invited lecture**).
- "27th Current Trends in Computational Chemistry, Jackson (Mississippi, USA), 08/09-11-2019. "Towards a bespoke design of chiral photoswitches operating away from the global free-energy minimum", Ruolo: relatore (**plenary lecture**).
- "7th international symposium of Institute for Catalysis, Hokkaido University" Sapporo (JP), 31-07-2019. "Tuning the properties of chiral photoswitches jumping through their free-energy pathways", Ruolo: relatore (**keynote lecture**).
- 17th Conference on Chiroptical Spectroscopy - CD 2019 Pisa (IT) 23/27-06-2019 "Light-driven chiral transitions of conjugated polymers jumping through their free-energy pathways". Ruolo: relatore (**contributed lecture**).
- "Y-Rich 2019, Roma (IT) 27-05-2019, "I progetti di ricerca per giovani chimici: gli ingredienti per una proposta di successo". Ruolo: relatore (**invited lecture**).
- "25th Course A Scientific Journey in the World of Liquid Crystals and Beyond. A Workshop to Celebrate Claudio Zannoni's 70th Birthday" Erice (IT), 07/10-10-2018. "Targeting the Polymer Self-Assembling through Nanoscale Simulations and Chirality Indexes" Ruolo: relatore (**invited lecture**).
- "256th National Meeting" Boston 19/23-08-2018. "Free-energy predictions of self-assembling polymers through nanoscale simulations" Ruolo: relatore (**contributed lecture**).
- Translational Chemistry Conference - IC3TC 2017 Caparica (Portugal), 04/07/-12-2017. "Switching the screw-sense in self-assembling polymers through nanoscale simulations". Ruolo: relatore (**invited lecture**).
- "Chirality 2016" Catania, (IT) dal 03/05-09-2016. "Switching chirality in self-assembling polymers". Ruolo: relatore (**contributed lecture**).

- Conferenza di supercalcolo europea PRACEdays16, Prague (Czech Republic), 10/12-05-2016. "Controlling and predicting the switchable screw-sense in self-assembling polymers". Ruolo: relatore (**invited lecture**).
- Membro del comitato organizzatore del congresso congiunto Calabria-Sicilia della Società Chimica Italiana, SCICASI 2015 03/04-12-2015.
- XXV Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Arcavata di Rende, (IT) 07/12-09-2014. "The effects of Zinc ion coordination on the A $\beta$ 1-42 conformational landscape". Ruolo: relatore (**contributed lecture**).
- XIX Scuola Nazionale di Chimica Bioinorganica, Pisa (IT), 22/24-10-2014. "Modeling and simulation of metal-protein interactions". Ruolo: relatore (**invited lecture**)
- International Symposium on Photochromism 2013. Berlin (DE), 23/26-09-2013. "Designing helical switches through enhanced sampling free energy methods". Ruolo: relatore (**contributed lecture**).
- Frontiers of Materials, Life and Particle Science explored by Ultra Slow Muon microscope. Matsue (JP), 9/12-08-2013 "Molecular mechanism of polyacrylate helix sense switching across its free energy landscape". Ruolo: relatore (**invited lecture**).
- 43rd IUPAC World Chemistry Congress, San Juan (PR), 30-07/08/2011. "Explaining the stereoselectivity of glycopeptide copper(II) dimers by free energy calculations." Ruolo: Relatore (**contributed lecture**).
- IX Convegno Nazionale INBB, Roma 21-10-2008 "Metodi computazionali per lo studio del misfolding proteico: Interazione tra l'amiloide beta e la regione N-terminale del prione umano", Ruolo: relatore (**invited lecture**).

Responsabilità scientifica per progetti di ricerca internazionali e nazionali, ammessi al finanziamento sulla base di bandi competitivi che prevedano la revisione tra pari.

- Responsabile scientifico dell'unità di ricerca dell'Università Magna Græcia di Catanzaro del progetto PRIN2017 "The inorganic side of lysosome cell biology: the network of metal-protein interactions" – 2017WBZFHL\_003. Decorrenza: 29/10/2019 - 29/10/2022. Data pubblicazione decreto: 31-07-2019.
- Responsabile scientifico dell'unità di ricerca dell'Università Magna Græcia di Catanzaro del progetto PRIN2015 "Role of metal dyshomeostasis and ubiquitin-proteasome system derangement in brain pathologies: risk factors and neuroprotective strategies" – 20157WZM8A\_007. Decorrenza: 05/02/2017 - 05/02/2020. Data pubblicazione decreto: 20-09-2016.
- Progetto di supercalcolo europeo Partnership for Advancing Computing in Europe (PRACE) Research Infrastructure 14th call "NANOASSEMBLY-Targeting the polymer assembling in supramolecular nanoparticles for in cell imaging devices" 2016153545 pr53ni Ruolo: responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 04-04-2017 al 04-04-2018.
- Progetto di supercalcolo nazionale IS CRA CHIREXTS HP10BZYEI9 Ruolo: responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 10-05-2019 al 10-05-2020.
- Progetto di supercalcolo nazionale IS CRA EXTROT HP10CAH3FO Ruolo: responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 10-05-2019 al 10-02-2020.
- Progetto di supercalcolo nazionale IS CRA LightRot HP10CE4O7O Ruolo: responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 06-08-2018 al 06-05-2019.
- Progetto di supercalcolo nazionale IS CRA CHIRASIM HP10BPKQHU Ruolo: responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 03-08-2017 al 03-08-2018.

- Progetto di supercalcolo nazionale ISCRA STEPROT - HP10CVZCNQ Ruolo: responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 11-10-2016 al 11-07-2016.
- Progetto di supercalcolo nazionale ISCRA ECDROT - HP10C25YVQ. Ruolo: responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 09-04-2016 al 09-10-2016.
- Progetto di supercalcolo nazionale ISCRA Nanospec - HP10CIWR6J. Ruolo: responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 10-06-2015 al 10-03-2016.
- Progetto di supercalcolo nazionale ISCRA CHIRPOLY-HP10BBVJD0. Ruolo: responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 18-12-2014 al 18-12-2015.
- Progetto di supercalcolo nazionale ISCRA POLYspec-HP10C4OLEO. Ruolo: responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 10-10-2014 al 10-07-2015.
- Progetto di supercalcolo nazionale ISCRA AACADP - HP10BEJGV2. Ruolo: responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 04-11-2013 al 04-11-2014.
- Progetto di supercalcolo nazionale ISCRA ECDpoly - HP10CJLYE7. Ruolo: responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 30-10-2013 al 30-07-2014.
- Progetto di supercalcolo europeo Partnership for Advancing Computing in Europe (PRACE) Research Infrastructure 5th call. 2012061071, Pra05\_1071. Ruolo: responsabile Scientifico (Principal Investigator) dal 26-10-2012 al 31-10-2013.
- Progetto di supercalcolo nazionale Iscra EOCEM - HP10AV4D17. Ruolo responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 19-07-2010 al 19-10-2011.
- Vincitore del progetto Futuro in ricerca 2008: "A Multidisciplinary Approach to Unveil the Determinants of Neurodegenerative Diseases" - RBF083JUS\_002 (03-08-2010). Ruolo: Responsabile scientifico dell'unità di ricerca dell'Università di Catania.

Direzione o partecipazione alle attività di un gruppo di ricerca caratterizzato da collaborazioni a livello nazionale o internazionale

- Direzione del gruppo di ricerca "NanoChem- Nanoscale Simulations and Chemical modeling" presso l'Università Magna Graecia di Catanzaro.
- Attività di ricerca in collaborazione (internazionale) con il Prof. Tamaki Nakano, Catalysis Research Center, Hokkaido University (progetto di ricerca finanziato dal Partnership for Advancing Computing in Europe (PRACE) 5th call. 2012061071. Ruolo: Responsabile Scientifico (Principal Investigator) dal 26-10-2012 al 31-10-2013.
- Attività di ricerca in collaborazione (internazionale) con il Prof. Francisco Raymo, University of Miami (progetto di ricerca finanziato dal Partnership for Advancing Computing in Europe (PRACE) 14th call 2016153545. Ruolo: responsabile scientifico (Principal Investigator) dal 04-04-2017 al 04-04-2018.
- Attività di ricerca in collaborazione (nazionale) con il Prof. Enrico Rizzarelli, Università di Catania (progetto PRIN 2010-2011: Ioni Metallici nelle Patologie da Invecchiamento: Interplay tra Metallostasi e Proteostasi nella Neurodegenerazione. Ruolo: partecipante dal 01-02-2013 al 01-02-2016.

Responsabilità di studi e ricerche scientifiche affidati da qualificate istituzioni pubbliche o private

- Responsabile dell'attività di ricerca della Dott.ssa MariaGrazia Fortino titolare dell'Assegno di Ricerca dal titolo "Sviluppo di metodi basati sulla Teoria del Funzionale della densità per la progettazione di molecole fotoattive" – SSD CHIM/03.

- Responsabile dell'attività di dottorato della Dott.ssa Concetta Cozza afferente al XXXIII ciclo di dottorato in Scienze della Vita dell'Università Magna Græcia di Catanzaro.
- Responsabile dell'attività di stage del Dr. Fabrizio Bossis affidata dal Consortium GARR in collaborazione con l'Università degli studi di Bari dal 02-02-2015 al 27-02-2015.
- Responsabilità di ricerca in qualità di "Project Assistant Professor" dal Catalysis Research Center (Hokkaido University) dal 04-08-2013 al 17-09-2013.
- Responsabilità delle ricerche scientifiche affidate attraverso un incarico di collaborazione esterna conferito dal Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università degli studi di Catania dal 15-01-2008 al 29-02-2008.

#### Partecipazione in commissioni di valutazione:

- Componente della commissione di esame finale di dottorato di ricerca in "Medicina Traslazionale" - XXXII ciclo, Università della Calabria.
- Esperto valutatore dei progetti regionali dell'Università della Calabria per il bando 2011. EPR-POR CALABRIA FSE 2007-2013.

#### Partecipazione come revisore di progetti o articoli scientifici

Referee per American Chemical Society, Royal Society of Chemistry, Elsevier, Bentham publisher, MDPI, MIUR (progetti PRIN e Futuro in Ricerca).

#### Partecipazione al collegio dei docenti ovvero attribuzione di incarichi di insegnamento, nell'ambito di dottorati di ricerca accreditati dal Ministero.

- Membro del collegio dei docenti del dottorato in "Scienze della Vita", Università di Catanzaro (cicli XXIX, XXXIII, XXXIV, XXXV, XXXVI).

#### Conseguimento di premi e riconoscimenti per l'attività scientifica, inclusa l'affiliazione ad accademie di riconosciuto prestigio nel settore.

- Premio Internazionale per la Chimica Raffaele Piria per l'anno 2015. Scilla, 27-12-2015.

#### Descrizione dell'attività di ricerca

L'attività scientifica è incentrata nel settore scientifico CHIM/03 e, in particolare, è focalizzata sulla chimica computazionale e sullo sviluppo di metodologie di calcolo per la predizione di strutture molecolari, della coordinazione metallica di interesse bioinorganico e di sistemi nanostrutturati, assieme alla predizione delle relative proprietà spettroscopiche e chiro-ottiche.

Negli ultimi anni, l'attività di ricerca si è focalizzata sullo studio dell'efficienza di *switch* macromolecolari indotti da irraggiamento, *binding* di piccoli ligandi e dalla coordinazione di metalli. La coordinazione dei metalli di transizione è trattata attraverso approcci *ab-initio* e QM-MM.

Di recente, le linee di ricerca riguardano lo sviluppo di metodi di campionamento e di predizione delle differenze di energia libera negli stati eccitati di macromolecole coniugate la cui rotazione intramolecolare è indotta da irraggiamento (**Cozza, Bonomi, Pietropaolo J. Chem Theory Comput. 2018 14:5441**). I risultati di queste ricerche sono resi disponibili nella piattaforma PLUMED-NEST, recentemente proposta per promuovere la riproducibilità nelle simulazioni molecolari (**Bonomi et al. Nature Methods. 2019 16, 670-673**).

I metodi sviluppati per determinare le variazioni di energia libera in strutture intrinsecamente chirali sono stati applicati per quantificare le barriere di attivazione nelle transizioni di *switch* polimerici chirali aventi in catena laterale un gruppo fluorenico connesso alle estremità a due unità di *tert*-butilbenzene (poly(2,7-bis(4-*tert*-butilphenil)9-fluoren-acrilato)). Sotto stimolo luminoso attraverso il gruppo in catena laterale, il polimero si srotola nella catena principale invertendo l'elicità (Pietropaolo, Nakano. *J. Am. Chem. Soc.*, 2013, 135, 5509–5512).

Un progetto analogo di induzione di chiralità mediante irraggiamento di luce circolarmente polarizzata su un poli(9,9'-diottil)fluorene (43-mer) ha ottenuto il finanziamento di 24 milioni di ore calcolo attraverso il progetto europeo di supercalcolo "PRACE" 5th call. In particolare, il poly(9,9-dioctylfluoren-2,7-diyl) inizialmente racemico negli angoli diedri acquista un ordine indotto nei diedri sotto l'azione della luce circolarmente polarizzata. Le simulazioni di energia libera nel percorso di chiralità indicano che la transizione non avviene su una singola catena isolata, ma in presenza di diverse catene del polimero su silice amorfa. Questo risultato ha predetto il dato sperimentale in cui il polimero mostra un segnale di dicroismo circolare solamente quando è depositato su film ma non quando è presente in una soluzione diluita o in una fase aggregata (Pietropaolo, Wang, Nakano. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2015 54:2688-2692).

Diversi progetti sono attualmente in corso e includono:

- la predizione dell'efficienza di *switch* macromolecolari e nanostrutturati chirali per potenziali applicazioni in fotocatalisi o fotofarmacologia.

Pubblicazioni inerenti selezionate: Cozza *et al. J. Chem Theory Comput.* 2018, 14, 5441; Pietropaolo *et al. Angew. Chem. Int. Ed.* 2015, 54, 2688; Pietropaolo, Nakano *J. Am. Chem. Soc.* 2013, 135, 5509.

- La predizione dell'energetica della coordinazione dei metalli di transizione su specifiche porzioni proteiche connesse a patologie ad alto impatto sociale.

Pubblicazioni inerenti selezionate: Pietropaolo *et al. ACS Chem Neurosci.* 2018 16, 1095; Magrì *et al. Chem. Eur. J.* 2017, 23, 17898; Travaglia *et al. Chem Eur J* 2012, 18, 15618; Grasso *et al. Chem Eur J* 2011, 17, 2752.

- Lo sviluppo di metodi di calcolo per la predizione di proprietà spettroscopiche ed energetiche in sistemi nanostrutturati, biomolecolari e chirali.

Pubblicazioni inerenti selezionate: Bellia *et al. Chem. Sci.* 2019, 10, 2732; Pietropaolo *et al. Nanoscale*, 2017, 9, 4989; Pietropaolo *et al BBA-Bioenergetics* 2016, 1857, 772; Grasso *et al. Chem. Commun*, 2015, 51, 15724; Pietropaolo *et al. J Comput Chem*, 2011, 32, 2627.