

ALLEGATO B

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n.1 posto/i di Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24, comma 3, lettera b) della Legge 240/2010 per il settore concorsuale 02/D1, settore scientifico-disciplinare FIS/07 Fisica Applicata presso il Dipartimento di BIOTECNOLOGIE MEDICHE E MEDICINA TRASLAZIONALE, (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 343/2023 del 20/01/2023) Codice concorso 5203

Andrea Spitaleri

CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	SPITALERI
NOME	ANDREA
DATA DI NASCITA	19.07.1973

TITOLI

TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA O EQUIVALENTI, OVVERO, PER I SETTORI INTERESSATI, DEL DIPLOMA DI SPECIALIZZAZIONE MEDICA O EQUIVALENTE, CONSEGUITO IN ITALIA O ALL'ESTERO

22/02/2006, PhD in Chimica,
Università di Sheffield (UK),
Titolo: "1H NMR Investigation of Crystal Nucleation in Solution"
Supervisor: Prof. Christopher A. Hunter

TITOLO DI STUDIO

16/11/1999
Laurea in Chimica (vecchio ordinamento), Università di Pisa,
Titolo: "Ruthenium nanoparticles on polydimethylphosphazene: preparation, structural study and catalytic activity"
Relatore: Prof. Dario Pini
Voto: 105/110

CONTRATTI DI RICERCA, ASSEGNI DI RICERCA O EQUIVALENTI

16.11.2022-oggi
Ricercatore chimico computazionale, Neurogenomics, Human Technopole, Milano, Italia

01.06.2020-14.11.2022
Ricercatore bioinformatico, Emerging Bacterial Pathogens Unit, Libera Università Vita Salute S. Raffaele, Milano, Italia

01/06/2018-31/05/2020
Ricercatore bioinformatico, Center for Omics Science, Ospedale San Raffaele, Milano, Italia

07/05/2014-oggi

Cofondatore e Consulente scientifico di BiKi Technologies srl, Genova, Italia

01/09/2013-31/05/2018

Ricercatore Post-dottorato, Istituto Italiano di Tecnologia, Genova, Italia

01/01/2011-31/12/2013

Principal Investigator di un grant di ricerca AIRC - Ospedale San Raffaele, Milano, Italia

01/03/2010-30/11/2010

Collaboratore scientifico in visita e Principal investigator HPC2 grant Grupo de Biofisica computacional, CNIO, Madrid, Spagna

05/01/10/2006-30/11/2006

Collaboratore scientifico in visita e Principal investigator HPC2 grant Bijvoet Centre for Biomolecular Research at University of Utrecht (NL)

04/2005-31/08/2013

Ricercatore Post-dottorato, Ospedale San Raffaele, Milano, Italia

01/01/2004-30/09/2004

Collaboratore scientifico a contratto presso AstraZeneca Pharmaceutical, Macclesfield, UK

01/01/2001-31/08/2001

Collaboratore scientifico a contratto presso EPFL, Losanna, Svizzera

01/01/2000-31/08/2000

Collaboratore scientifico a contratto presso il Dipartimento di Bioorganica, Università di Pisa, Pisa, Italia

ATTIVITÀ DIDATTICA A LIVELLO UNIVERSITARIO IN ITALIA O ALL'ESTERO

(inserire periodo [gg/mm/aa inizio e fine], anno accademico, ateneo, corso laurea, numero ore, ecc.)

2021-2022 Professore a contratto, per il corso di Biologia Cellulare, “Esercitazioni sul calcolo computazionale in ambito medico”, Libera Università “Vita Salute S.Raffaele” Milano, Dip. FACOLTA' DI MEDICINA E CHIRURGIA

2020-2021 Professore a contratto, per il corso di Biologia Cellulare, “Esercitazioni sul calcolo computazionale in ambito medico”, Libera Università “Vita Salute S.Raffaele” Milano, Dip. FACOLTA' DI MEDICINA E CHIRURGIA

2019-2020 Professore a contratto, per il corso di Biologia Cellulare, “Esercitazioni sul calcolo computazionale in ambito medico”, Libera Università “Vita Salute S.Raffaele” Milano, Dip. FACOLTA' DI MEDICINA E CHIRURGIA

2020 Docente a contratto del modulo “Structural Biology” del Master di secondo livello in “Bioinformatics and Functional Genomics”, presso Università degli Studi di Milano, Italia. Lezioni di introduzione bioinformatica al WGS e calcoli di docking proteina-proteina

2019 Docente a contratto del modulo “Structural Biology” del Master di secondo livello in “Bioinformatics and Functional Genomics”, presso Università degli Studi di Milano, Italia. Lezioni di calcoli di docking proteina-proteina

DOCUMENTATA ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA PRESSO QUALIFICATI ISTITUTI ITALIANI O STRANIERI;

(inserire anno accademico, ente, corso, periodo, ecc.)

2022-oggi Human Technopole, Milano, Dipartimento di Neurogenomica

1. Sviluppo ed applicazione di metodologie computazionali per lo studio di effetti di mutazioni in proteine coinvolte in malattie neurodegenerative.
2. Studio interazione proteina-lipoparticelle per la caratterizzazione di isoforme APOE coinvolte nella malattia Alzheimer.
3. Sviluppo di nuovi approcci computazionali per lo studio evolutivo di canali ionici coinvolti nella comunicazione “in-out” cellulare attraverso la ricostruzione di elettrofisiologia computazionale.
4. Sviluppo di nuovi approcci computazionali per lo studio della network comunicativa tra i residui delle proteine utilizzando inferenza relazionale neurale.

2018-2022 Ospedale San Raffaele - Università Vita-Salute San Raffaele, Milano

1. Studio dell'interazione proteina-peptide e proteina-nanoparticelle nello sviluppo di nuove terapie per la resistenza antibiotica utilizzando nanoparticelle come “drug delivery”.
2. Sviluppo *in silico* di un vaccino per *Klebsiella pneumoniae* batterio utilizzando sistemi *ompK35* incorporati in membrana POPC (work package Ricerca finalizzata 2021 Ministero della Salute).
3. Studio e caratterizzazione del folding di “small RNA” coinvolti nella resistenza antibiotica.
4. Sviluppo ed applicazione di nuovi approcci computazionali per lo studio e predizione della resistenza antibiotica da dati clinici.
5. Applicazione di analisi di dati WGS allo studio della resistenza antibiotica.

2013-2018 Istituto Italiano di Tecnologia, Genova

1. Sviluppo di metodologie computazionali per lo studio e la predizione della cinetica di dissociazione dei complessi farmaco-proteina.
2. Studio computazionale della interazione SRC kinase con farmaci e della corrispondente cinetica di associazione e dissociazione.
3. Studio computazionale della interazione GPCR proteine con molecole di interesse farmacologico.
4. Studio *in silico* di una proteina ingegnerizzata utilizzata come nanoporo biologico per riconoscere la sequenza di un peptide traslocante mediante segnale FRET.
5. Sviluppo di un nuovo metodo computazionale per effettuare docking flessibile utilizzando la dinamica molecolare *enhanced*. Metodo incluso in BiKi Life Sciences suite (MD-Binding).

2005-2013 Dulbecco Telethon - Ospedale San Raffaele, Milano

1. Studi strutturali sperimentali e computazionali di HMGB1 e dei suoi complessi con molecole di origine naturale con azione antinfiammatoria (glicirrizina, carbenoxolone).
2. Studi strutturali sperimentali dei domini PHD fingers e dei complessi da essi formati nell'ambito della sindrome poliendocrina autoimmune di tipo 1 (APECED).
3. Studi *in silico* dell'interazione tra integrine e peptidomimetici nell'ambito dello studio dell'angiogenesi del tumore (principal investigator grant AIRC)

REALIZZAZIONE DI ATTIVITÀ PROGETTUALE

2022 Organizzatore del workshop virtuale "Genomics and Bioinformatics applied to TB Workshop", <https://gallantries.github.io/video-library/events/mtb-ngs/program.html> Questo corso avanzato ha permesso di acquisire capacità sia teoriche che pratiche relative al sequenziamento del genoma di MTBC e all'analisi bioinformatica dei dati MTBC WGS. 21/03/2022-25/03/2022

2022 Organizzatore del workshop "Bioinformatic analysis" per il European Reference TB Laboratory Network (ERLTB-Net2) small capacity building training, Milano, Italia. Questo corso avanzato ha permesso di acquisire capacità sia teoriche che pratiche relative al sequenziamento del genoma di MTBC e all'analisi bioinformatica dei dati MTBC WGS. 04/04/2022-08/04/2022

2021 Organizzatore del workshop Next-Generation Sequencing of SARS-CoV-2 FIND, the global alliance for diagnostics, <https://www.futurelearn.com/courses/next-generation-sequencing-of-sars-cov-2>

2020 Organizzatore del VII Annual retreat of Division of Genetics and Cell Biology of San Raffaele Hospital, Milan, Italy. Evento organizzato in modalità virtuale. L'organizzazione prevedeva la raccolta di fondi tramite sponsorship industriali, individuazione della località, scelta degli "invited speakers", scelta degli abstracts per poster session e relazioni orali, chairman di sessioni scientifiche, organizzazione della tavola rotonda con il Prof. Massimo Delledonne.

2019 Organizzatore del VI Annual retreat of Division of Genetics and Cell Biology of San Raffaele Hospital, Milan, Italy. Evento organizzato presso Centro Paolo VI, Brescia, Italia L'organizzazione prevedeva la raccolta di fondi tramite sponsorship industriali, individuazione della località, scelta degli "invited speakers", scelta degli abstracts per poster session e relazioni orali, chairman di sessioni scientifiche, organizzazione della tavola rotonda con il Prof. Massimo Cacciari.
<https://sites.google.com/view/dgcbretreat> .

07.05.2014-oggi Co-fondatore, amministratore delegato e consulente scientifico di BiKi Technologies SRL (Genova, Italia) start-up ad alto contenuto tecnologico. <http://www.bikitech.com/team/>

07.05.2014 Collaborazione scientifica con la start-up BiKi Technologies s.r.l Conduzione di progetti di ricerca in collaborazione con partner industriali (Servier, Sanofi, Pfizer, Astrazenca, Astex, Angelini, Chiesi) e accademia (UNIMI, UNIMIB, IIT, UNIBO). I progetti di ricerca si basavano su consulenza scientifica su reali target farmaceutici di interesse industriale. In particolare, docking flessibile, analisi di *koff*, determinazione di pocket.

01.01.2011-31.12.2013 Principal Investigator, My First AIRC Grant, Associazione Italiana per la Ricerca sul Cancro, "Modulation of integrin-binding selectivity: a computational approach". Il progetto di 3 anni prevedeva un'analisi conformazionale sistematica *in silico* di piccoli ciclopeptidi, docking dei vari conformeri sull'integrina coinvolta in angiogenesi del tumore.

2010 HPC-Europa2 project, CNIO, Madrid, "The effect of epigenetic modifications in the binding mechanism of histone tails with PHD fingers proteins". Il progetto prevedeva l'applicazione di bias-exchange metadynamica per studiare il meccanismo di binding proteina-peptide attraverso l'utilizzo di 10,000 ore di calcolo HPC.

2006 HPC-Europa2 project, University of Utrecht, "Information-driven protein-ligand docking: introducing NMR-based filters". Il progetto prevedeva lo sviluppo di un nuovo approccio chimico-fisico per formulare una nuova funzione di scoring nel docking, attraverso l'utilizzo di 10,000 ore di calcolo HPC.

ORGANIZZAZIONE, DIREZIONE E COORDINAMENTO DI GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI, O PARTECIPAZIONE AGLI STESSI

(per ciascuna voce inserire anno, ruolo, gruppo di ricerca, ecc.)

2006 Modellizzazione delle strutture proteina-ligando tramite calcoli di docking e dati di NMR di HMGB1 e carbenoxolone usando HADDOCK software. Collaborazione con Prof. M.E. Bianchi, Ospedale San Raffaele Institute. Ruolo e competenze: Preparazione di topologie del ligando, setup del calcolo, esecuzione ed analisi di simulazioni. 04/04/2005-04/04/2006

2006-2007 Modellizzazione delle strutture proteina-ligando tramite calcoli di docking, dinamica molecolare e dati di NMR di SH3 e peptide poliprolina usando HADDOCK e GROMACS software. Collaborazione con Dr.ssa A Boletta, Ospedale San Raffaele Institute. Ruolo e competenze: Preparazione di topologie del ligando, setup del calcolo, esecuzione ed analisi di simulazioni.

2007 Sviluppo di una nuova funzione di scoring delle strutture proteina-ligando e proteina-proteina tramite calcoli di docking e perturbazione del chemical shift, usando HADDOCK e GROMACS software. Collaborazione con Prof. AMJJ Bonvin Utrecht University (HPC Europa project) Ruolo e competenze: Preparazione di topologie del ligando, setup del calcolo, esecuzione ed analisi di simulazioni.

2008-2012 Modellizzazione delle strutture proteina-peptidomimetico tramite calcoli di docking, dati di NMR e di dinamica molecolare "enhanced" (metadynamics) di integrina $\alpha V\beta 3$ e ciclopeptidi basati su sequenza RGD. Collaborazione con Dr. Gianpaolo Rizzardi (Molmed S.P.A) e Prof. Angelo Corti (Ospedale San Raffaele) Ruolo e competenze: Preparazione di topologie del ciclopeptide, setup del calcolo, esecuzione ed analisi di simulazioni.

2010-2012 Modellizzazione delle strutture proteina-peptide tramite calcoli di dinamica molecolare "enhanced" (metadynamics) di PHD fingers e histone tails. Collaborazione con Prof. FL Gervasio, Grupo de biofisica computacional, Spain, (HPC Europa2 Project). Ruolo e competenze: Preparazione di topologie del ligando, setup del calcolo, esecuzione ed analisi di simulazioni.

2013-2014 Modellizzazione della struttura proteina-proteina sotto stress ossidativo tramite calcoli di dinamica molecolare e docking tra Ceruloplasmina ed Integrina nello studio nella trasmissione del segnale intracellulare. Collaborazione con Dr. M. Alessio, Head, Proteome biochemistry Unit. Ospedale San Raffaele, Milano, Italia. Ruolo e competenze: Preparazione di topologie del ligando, setup del calcolo, esecuzione ed analisi di simulazioni.

2013-2018 Sviluppo ed implementazione nel software BiKi Life Science di BiKi Technologies s.r.l. di algoritmi per simulare il processo di legame tra proteina e ligando (docking flessibile). Collaborazione con Dr. W Rocchia (Istituto Italiano di Tecnologia), Prof. A Cavalli (UNIBO). Ruolo e competenze: Preparazione di topologie del ligando, setup del calcolo, esecuzione ed analisi di simulazioni. Benchmark ed implementazione dell'algoritmo MD-Binding in BiKi Life Sciences.

2017-2018 Work package in Horizon 2020 progetto No 687089 PROSEQO, <https://singleproteinsequencing.eu/people> Sviluppo (proof-of-concept) di una nuova tecnologia di sequenziamento di proteine che utilizza nanostrutture plasmoniche per potenziare la rivelazione ottica e controllare il movimento delle molecole mediante intrappolamento ottico mediante la spettroscopia FRET. Collaborazione con Dr. F De Angelis (Istituto Italiano di Tecnologia). Ruolo e competenze: Preparazione di topologie del ligando, setup del calcolo, esecuzione ed analisi di simulazioni usando CINECA HPC. Lavoro pubblicato su rivista con alto impact factor

2018-2022 Basi molecolari e caratterizzazione dei meccanismi di resistenza antimicrobica tramite calcoli di dinamica molecolare "enhanced" e docking. Lo studio prevede l'utilizzo di dati sperimentali di genomica ed attraverso approcci computazionali l'interpretazione del meccanismo di resistenza di alcuni antibiotici comunemente utilizzati. Infine, metodi di machine learning vengono applicati per poter predire la resistenza ed i loro fattori trainanti. Collaborazione con molteplici gruppi internazionali afferenti all'OMS (Organizzazione Mondiale di Sanità) e ECDC (European Centre for Disease Prevention and Control). Ruolo e competenze: Individuazioni e caratterizzazione di mutazioni a livello genomico tramite approcci bioinformatici. Modellizzazione attraverso AlphaFold2 delle mutazioni sulle proteine. Preparazione di topologie del ligando, setup del calcolo, esecuzione ed analisi di simulazioni. 01/06/2018-14/11/2022

2018-2021 Work package in Comprehensive Resistance Prediction for Tuberculosis: an International Consortium (CRyPTIC, <http://www.crypticproject.org/>) per studiare e predire mutazioni sui genomi e loro effetti sulle proteine di >10.000 genomi di batteri (tubercolosi). Collaborazione con Dr. Philip Fowler, University of Oxford, UK. Ruolo e competenze: Individuazioni e caratterizzazione di mutazioni a livello genomico tramite approcci bioinformatici. Modellizzazione attraverso AlphaFold2 delle mutazioni sulle proteine. Preparazione di topologie del ligando, setup del calcolo, esecuzione ed analisi di simulazioni.

2023-2026 Work package in Ricerca Finalizzata del Ministero della Salute “B cells-driven protection *Klebsiella pneumoniae*: potential for prevention and treatment (KP-PROTECT)”, codice del progetto RF-2021-12372668. Il work package computazionale prevede la determinazione di putativi epitopi ti proteine transmembrane come Ompk35 per lo sviluppo di nuovi vaccini per combattere la resistenza antibiotica. Ruolo e competenze: Individuazione e caratterizzazioni di molteplici sequenze scaricate da database italiano ed internazionale. Caratterizzazione a livello proteico della struttura proteica e l’influenza della struttura all’interno di una membrana lipidica POPC/POPE. Modellizzazione dei vari segmenti proteici attraverso calcoli di Monte Carlo e Dinamica Molecolare. Setup del sistema proteina+membrana, esecuzioni ed analisi di simulazioni. Calcolo di docking tra proteina in membrana e peptidi.

TITOLARITÀ DI BREVETTI

(per ciascun brevetto, inserire autori, titolo, tipologia, numero brevetto, ecc.)

Coautore di brevetto in collaborazione con Chiesi Farmaceutici S.P.A., Associazione per la lotta alla talassemia di Ferrara, Associazione veneta per la lotta alla talassemia. Titolo del brevetto: "3-deoxy-3-amide derivatives of carbohydrates as inducers of erythroid cell differentiation". Prof. Giorgio Catelani, D’Andrea Felicia, Gambari Roberto, Andrea Spitaleri, Application Number PCT/IB02/04042

ATTIVITÀ DI RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI E INTERNAZIONALI

(inserire titolo congresso/convegno, data, ecc.)

Relatore al workshop "2nd EU-NMR Annual User Meeting", Autrans, France. Titolo della relazione (talk): "Combined use of NMR binding studies and computational methods to characterize novel aVb3 interactors" ,07/01/2009-10/01/2009

Relatore al workshop "Summer school on simulation approaches to problems in molecular and cellular biology", Belfast, Irlanda del Nord. Titolo della relazione (poster session): "Combined use of NMR binding studies and computational methods to characterize novel aVb3 interactors". 31/08/2009-04/09/2009

Relatore al workshop "1st Metodi Computazionali per i processi chimici e biochimici", Vignale Monferrato, Italia. Titolo della relazione (talk): " Uso della meta-dinamica nella progettazione di antagonisti di isoDGR-Based avb3 per una regolazione fine dell’insieme conformazionale". 10/05/2011-13/05/2011

Relatore al workshop "2nd Metodi Computazionali per processi chimici e biochimici", Vignale Monferrato, Italia. Titolo della relazione (talk): " Protein structure and dynamics: NMR data and Simulations". 22/05/2012-25/05/2012

Relatore al workshop "Exploring Protein Interactions through Theory and Experiments", Cecam, Losanna, Svizzera. Titolo della relazione (talk): "Molecular mechanism study of the encountering complex between the histone tails with PHD finger proteins: the effect of epigenetic modifications". <https://www.cecarn.org/workshop-details/679>. 24/09/2012-26/09/2012

Relatore al workshop "Enhancing molecular simulations with PLUMED", Belfast, Irlanda del Nord. Titolo della relazione(talk): "Metadynamics in the design and conformational characterization of X1-RGD-X2 based α v β 3 integrin antagonist" <https://www.cecami.org/workshop-details/539>. 28/05/2014-02/06/2014

Relatore al workshop "Advanced modeling to investigate biomolecules", Genova, Italia. Titolo della relazione(talk): "Fast Protein-Ligand and Protein-Peptide docking via enhanced sampling molecular dynamics" <https://www.cecami.org/workshop-details/471>. 20/11/2014-21/11/2014

Relatore al "X EUROPEAN WORKSHOP IN DRUG DESIGN" meeting, Siena, Italia. Titolo presentazione orale: "Studying protein-ligand via enhanced molecular dynamics simulations: the MD-Binding algorithm" Presentazione orale terza classificata tra gli abstract scelti tra i poster. 17/05/2015-22/05/2015

Relatore al Training report and updated plan, H2020 EINFRA-5-2015 project number 675728. EMBL-EBI, Hinxton, UK. Titolo della relazione(talk): "Molecular dynamics and enhanced sampling to describe protein-ligand binding" <https://zenodo.org/record/574620#.YpfiozlByV4>. 03/05/2016-04/05/2016

Relatore al "21st EuroQSAR" meeting. Verona, Italia Titolo della relazione (poster session): "Studying protein-ligand via enhanced molecular dynamics simulations: the MD-Binding algorithm" https://www.ldorganisation.com/v2/produits.php?cle_menus=1238915962. 04/09/2016-08/09/2016

Relatore al "Computational Advances in Drug Discovery - SBDD2017" meeting, Losanna, Svizzera. Titolo della relazione (poster session): "Enhancing Protein-Ligand binding simulation by biasing local hydrophobicity". 05/08/2017-08/08/2017

CONSEGUIMENTO DI PREMI E RICONOSCIMENTI NAZIONALI E INTERNAZIONALI PER ATTIVITÀ DI RICERCA (inserire premio, data, ente organizzatore, ecc.)

01.01.2011-31.12.2013 Principal Investigator, My First AIRC Grant, Associazione Italiana per la Ricerca sul Cancro, "Modulation of integrin-binding selectivity: a computational approach". Grant di 150.000€

2014 European Workshop in Drug Design Workshop, Best poster session in developing new flexible docking

2010 HPC-Europa2 fellowship, EU (HPC-Europa2 Pan European Research Infrastructure on High Performance Computing), to develop the following project: "The effect of epigenetic modifications in the binding mechanism of histone tails with PHD fingers proteins". HPC resource Mare Nostrum, Spain. Project developed in CNIO, Madrid

2007 HPC resources under Distributed European Computing Initiative, European HPC services, to develop the following project: "A dynamic model of integrin α v β 3-cyclopeptides interaction"

2006 HPC-Europa2 fellowship, EU (HPC-Europa2 Pan European Research Infrastructure on High Performance Computing), to develop the following project: "Information-driven protein-ligand docking: introducing NMR-based filters". HPC resource SARA, NL. Project developed in Utrecht University, University

PRINCIPALI INTERESSI

1. Proteine/ligandi/nucleici acidi interazioni
2. Comunicazione intra-proteina (network)
3. Interazioni nanoparticelle in drug delivery
4. Proteine ingegnerizzazione in sensori and vaccini

5. Predizione e caratterizzazione di target di smRNA/lncRNA
6. Meccanismo nella resistenza antibiotica
7. Sviluppo di nuovi metodi per automatizzare processi di analisi

ULTERIORI INFORMAZIONI

Abilitazioni scientifiche nazionali

Abilitazione Scientifica Nazionale 2022-2032 a professore di II fascia nel settore disciplinare 03/D1 (Chimica e Tecnologie Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutico-Alimentari)

Abilitazione Scientifica Nazionale 2022-2032 a professore di II fascia nel settore disciplinare 05/E1, (Biochimica Generale)

Abilitazione Scientifica Nazionale 2022-2032 a professore di II fascia nel settore disciplinare 02/D1 (Fisica Applicata, Didattica e Storia della Fisica)

Attività editoriali

Revisore per riviste scientifiche internazionali (Scientific Reports, Journal of Chemical Information and Modeling, PLOS, Frontiers)

COMPETENZE PROFESSIONALI

Chimica fisica computazionale

Dinamica molecolare classica e “enhanced” (metadynamics, potential scaled, Adiabatic-bias Molecular Dynamics, MD-Binding), docking molecolare in proteina-proteina, proteina-ligando e proteina-acidi nucleici, simulazioni di sistemi molecolari con metodi Montecarlo classici, calcoli basati sulla teoria del funzionale di densità (density functional theory, DFT) per determinazione di parametri di molecole organiche. Applicazione di metodi di machine learning a dati di dinamica molecolare per lo studio di effetti allosterici e comunicazione intra-proteina. Coarse-grained simulazioni in ambito DNA/RNA per lo studio di folding di small-RNA. Calcolo dell’energia libera utilizzando FEP e Poisson-Boltzmann.

Chimica fisica sperimentale/Biofisica

Spettroscopia NMR monodimensionale per molecole organiche. Determinazione dello spostamento chimico (“chemical shift perturbation”) per la determinazione *in silico* di aggregati molecolari.

Biologia Computazionale/Bioinformatica

Analisi di dati di WGS short (Illumina) e long reads (Oxford Nanopore), *de novo* assembly di genoma, determinazioni di nuove mutazioni, analisi di trasmissione epidemiologica. Applicazione di metodi di machine learning a dati “omici”.

COMPETENZE INFORMATICHE

Competenze informatiche generali

Conoscenza approfondita della gestione avanzata dei sistemi operativi Linux e Microsoft Windows e dei loro più comuni applicativi; conoscenza degli strumenti di amministrazione e personalizzazione d’uso

dei sistemi operativi Linux per singolo utente e per gruppi di utenti attraverso reti locali. Conoscenza approfondita dello scripting e della programmazione/gestione dei dati e dei sistemi operativi nei più comuni linguaggi e ambienti principalmente per sistemi operativi Linux: Awk, Bash Native Language, TCL, Perl e Python (conoscenza avanzata); C, Fortran 77 (conoscenza di base). Buona conoscenza dell'hardware dei calcolatori

Competenze informatiche specifiche

Chimica computazionale: GROMACS, AMBER e NAMD (dinamica molecolare), BiKi Life Sciences e PLUMED (enhanced MD); SimRNA e oxDNA (coarse-grained DNA/RNA); CAMPARI (simulazioni molecolari Montecarlo); SwissModel, i-Tasser, MODELLER, ROSETTA e AlphaFold2 (modellizzazione per omologia di strutture di proteine); Vienna package (RNA/DNA structure); HADDOCK, ZDOCK, rDock, AutoDock, Glide Maestro Schrodinger suite (docking molecolare); Muscle, Omega, Mafft (multiple alignment sequence); IQ-Tree, RAML (anal RNWChem (calcoli quantomeccanici "ab initio"); MGLtools, RDKit, OpenBabel (chemoinformatica);

Spettroscopia NMR: SPARTA+, SHIFTS, SHIFTX (programmi per analisi ed interpretazione molecolare di spettri). Spettroscopia NMR monodimensionale per molecole organiche. Determinazione dello spostamento chimico ("chemical shift perturbation") per la determinazione *in silico* di aggregati molecolari.

Software e librerie scientifiche per elaborazione di dati numerici: Matlab, Octave, Gnuplot, R, Biopython, Pandas, Seaborn, Matplotlib, Networkx, PyTorch, MD-Task, MDAnalysis, MD-traj.

Visualizzazione molecolare: VMD, Avogadro, Pymol, Chimera

Analisi di dati di WGS: bwa, bowtie2, samtools, gatk, varscan, guppy2 Nanopore, metagenomica (kraken2, clarkS), 16S (QIIME2), assembly (spades, flye).RNA-seq

Pipeline tools: nextflow, nf-core, docker, singularity

Analisi statistica di dati di trascrittoma a singola cellula: CellRanger, pySCENIC (network inference).

SOFTWARE SVILUPPATI

MD-Binding: Flexible docking (BiKi Life Sciences)

GMXPBSA: Binding free energy calculation using MM/PBSA approach from GROMACS simulation (bash/perl)

nmropt Chemical shift perturbation calculation (Fortran and C language)

NMRScore Re-scoring poses from docking using chemical shift perturbation (perl, published in J.Med.Chem. 2008)

Muma Metabolomic Univariate and Multivariate Analysis (R language) <http://cran.r-project.org/web/packages/muma/index.html>)

CONOSCENZE LINGUISTICHE

Italiano: lingua madre

Inglese: ottima conoscenza della lingua scritta e parlata

Francese: buona conoscenza della lingua scritta e della lingua parlata.

Spagnolo: discreta conoscenza della lingua parlata e scritta

COMPETENZE ORGANIZZATIVE E GESTIONALI

2020 Tutor di 1 studenti in tirocinio di master (Master di secondo livello in "Bioinformatics and Functional Genomics", Università degli Studi di Milano).

2005-2013 Tutor di 2 dottorandi (Università degli studi di Milano).

Amministratore di sistema (Linux) di macchine calcolatrici per uso scientifico (2005 - presente)

Supporto tecnico per la raccolta, la gestione e l'analisi dei dati di WGS (2018-2022)

POSSESSO DEL DIPLOMA DI SPECIALIZZAZIONE EUROPEA RICONOSCIUTO DA BOARD INTERNAZIONALI (relativamente a quei settori concorsuali nei quali è prevista)

(indicare diploma, data di conseguimento, ecc.)

TITOLI DI CUI ALL'ARTICOLO 24 COMMA 3 LETTERA A) E B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240

(indicare se contratto di tipologia A o B, Ateneo, data di decorrenza e fine contratto, ecc.)

PRODUZIONE SCIENTIFICA

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

62 pubblicazioni (54 riviste internazionali peer reviewed, 2 capitoli in libri internazionali peer-reviewed + 2 capitoli in HPC series book, 3 abstract in convegni internazionali, 1 brevetto). Pubblicazioni degli ultimi 10 anni: 40; pubblicazioni come primo autore: 10; pubblicazioni come "corresponding author" or ultimo autore: 6; H index: 24; H index quinquennale: 21; numero totale di citazioni: 2199; citazioni degli ultimi 5 anni: 1241; fonte Google Scholar

(*: "corresponding author")

1. Federico Di Marco, Spitaleri A, Simone Battaglia, Virginia Batignani, Andrea Maurizio Cabibbe and Daniela Maria Cirillo (2023). Advantages of long- and short-reads sequencing for the hybrid investigation of the Mycobacterium tuberculosis genome. FRONTIERS IN MICROBIOLOGY, ISSN: 1664-302X, doi: doi.org/10.3389/fmicb.2023.1104456
2. Dohal M, Dvorakova V, Sperkova M, Pinkova M, Spitaleri A, Norman A, Cabibbe AM, Rasmussen EM, Porvaznik I, Skerenova M, Solovic I, Cirillo DM, Mokry J (2022). Whole genome sequencing of multidrug-resistant Mycobacterium tuberculosis isolates collected in the Czech Republic, 2005-2020. SCIENTIFIC REPORTS, vol. 12, ISSN: 2045-2322, doi: 10.1038/s41598-022-11287-5
3. Dohal M, Dvorakova V, Sperkova M, Porvaznik I, Cabibbe AM, Trovato A, Spitaleri A, Rasmussen EM, Prso K, Skerenova M, Cirillo DM, Solovic I, Mokry J (2022). Anti-tuberculosis drug resistance in Slovakia, 2018-2019: The first whole-genome epidemiological study. JOURNAL OF CLINICAL TUBERCULOSIS AND OTHER MYCOBACTERIAL DISEASES, vol. 26, ISSN: 2405-5794, doi: 10.1016/j.jctube.2021.100292 EA DEC 2021
4. Gupta S, Kumar C, Shrivastava K, Chauhan V, Singh A, Arora R, Giri A, Cabibbe AM, Sharma NK, Spitaleri A, Cirillo DM, Bose M, Varma-Basil M (2022). Whole genome sequencing of isoniazid

- monoresistant clinical isolates of *Mycobacterium tuberculosis* reveals novel genetic polymorphisms. *TUBERCULOSIS*, vol. 133, ISSN: 1472-9792, doi: 10.1016/j.tube.2022.102173
5. Manuto L, Grazioli M, Spitaleri A, Fontana P, Bianco L, Bertolotti L, Bado M, Mazzotti G, Bianca F, Onelia F, Lorenzin G, Simeoni F, Lazarevic D, Franchin E, Vecchio CD, Dorigatti I, Tonon G, Cirillo DM, Lavezzo E, Crisanti A, Toppo S (2022). Rapid SARS-CoV-2 Intra-Host and Within-Household Emergence of Novel Haplotypes. *VIRUSES*, vol. 14, ISSN: 1999-4915, doi: 10.3390/v14020399
 6. N Lore, F Di Marco, F Saliu, Spitaleri A, F Nicola, M Rossi, L Cariani, D Cirillo (2022). Unravelling the pathogenicity of *Mycobacterium abscessus* clinical isolates in cystic fibrosis pulmonary epithelial cell and mouse models of respiratory infection. *JOURNAL OF CYSTIC FIBROSIS*, vol. 21, ISSN: 1873-5010
 7. Nicola Ivan Lorè, Fabio Saliu, Spitaleri A, Daniel Schäfle, Francesca Nicola, Daniela Maria Cirillo, Peter Sander (2022). The aminoglycoside-modifying enzyme Eis2 represents a new potential in vivo target for reducing antimicrobial drug resistance in *Mycobacterium abscessus* complex. *EUROPEAN RESPIRATORY JOURNAL*, vol. 60, ISSN: 1399-3003, doi: 10.1183/13993003.01541-2022
 8. S Yordanova, Elizabeta Bachiyiska, Elisa Tagliani, Ana Baykova, Yuliana Atanasova, Spitaleri A, Daniela Maria Cirillo (2022). Whole Genome Sequencing of Bulgarian Rifampicin Resistant *Mycobacterium tuberculosis* Strains. *FOLIA MEDICA*, ISSN: 1314-2143, doi: 10.3897/folmed.64.e70554
 9. The CRyPTIC Consortium (2022). A data compendium associating the genomes of 12,289 *Mycobacterium tuberculosis* isolates with quantitative resistance phenotypes to 13 antibiotics. *PLOS BIOLOGY*, ISSN: 1544-9173, doi: 10.1371/journal.pbio.3001721
 10. The CRyPTIC Consortium (2022). Epidemiological cut-off values for a 96-well broth microdilution plate for high-throughput research antibiotic susceptibility testing of *M. tuberculosis*. *EUROPEAN RESPIRATORY JOURNAL*, ISSN: 1399-3003, doi: 10.1183/13993003.00239-2022
 11. Iannuzzi R, Rossetti G, Spitaleri A, Bonnal RJP, Pagani M, Mollica L (2021). A Simplified Amino Acidic Alphabet to Unveil the T-Cells Receptors Antigens: A Computational Perspective. *FRONTIERS IN CHEMISTRY*, vol. 9, ISSN: 2296-2646, doi: 10.3389/fchem.2021.598802
 12. Scafuri N, Soler MA, Spitaleri A, Rocchia W (2021). Enhanced Molecular Dynamics Method to Efficiently Increase the Discrimination Capability of Computational Protein-Protein Docking. *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, vol. 17, p. 7271-7280, ISSN: 1549-9618, doi: 10.1021/acs.jctc.1c00789 EA OCT 2021
 13. Spitaleri A, Garoli D, Schutte M, Lehrach H, Rocchia W, De Angelis F (2021). Adaptive nanopores: A bioinspired label-free approach for protein sequencing and identification. *NANO RESEARCH*, vol. 14, p. 328-333, ISSN: 1998-0124, doi: 10.1007/s12274-020-3095-z EA SEP 2020
 14. Spitaleri A, Zia SR, Di Micco P, Al-Lazikani B, Soler MA, Rocchia W (2021). Tuning Local Hydration Enables a Deeper Understanding of Protein-Ligand Binding: The PP1-Src Kinase Case. *THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS*, vol. 12, p. 49-58, ISSN: 1948-7185, doi: 10.1021/acs.jpcclett.0c03075
 15. Vargas R, Freschi L, Spitaleri A, Tahseen S, Barilar I, Niemann S, Miotto P, Cirillo DM, Koser CU, Farhat MR (2021). Role of Epistasis in Amikacin, Kanamycin, Bedaquiline, and Clofazimine Resistance in *Mycobacterium tuberculosis* Complex. *ANTIMICROBIAL AGENTS AND CHEMOTHERAPY*, vol. 65, ISSN: 0066-4804, doi: 10.1128/AAC.01164-21
 16. Battaglia S, Spitaleri A, Cabibbe AM, Meehan CJ, Utpatel C, Ismail N, Tahseen S, Skrahina A, Alikhanova N, Kamal SMM, Barbova A, Niemann S, Groenheit R, Dean AS, Zignol M, Rigouts L, Cirillo DM (2020). Characterization of Genomic Variants Associated with Resistance to Bedaquiline and Delamanid in Naive *Mycobacterium tuberculosis* Clinical Strains. *JOURNAL OF CLINICAL MICROBIOLOGY*, vol. 58, ISSN: 0095-1137, doi: 10.1128/JCM.01304-20
 17. Cabibbe AM, Spitaleri A, Battaglia S, Colman RE, Suresh A, Uplekar S, Rodwell TC, Cirillo DM (2020). Application of Targeted Next-Generation Sequencing Assay on a Portable Sequencing Platform for Culture-Free Detection of Drug-Resistant Tuberculosis from Clinical Samples. *JOURNAL OF CLINICAL MICROBIOLOGY*, vol. 58, ISSN: 0095-1137, doi: 10.1128/JCM.00632-20
 18. Decherchi S, Spitaleri A, Stone J, Rocchia W (2019). NanoShaper-VMD interface: computing and visualizing surfaces, pockets and channels in molecular systems. *BIOINFORMATICS*, vol. 35, p. 1241-1243, ISSN: 1367-4803, doi: 10.1093/bioinformatics/bty761
 19. Kouchaki S, Yang Y, Walker TM, Walker AS, Wilson DJ, Peto TEA, Crook DW, Clifton DA, Hoosdally SJ, Cruz ALG, Carter J, Grazian C, Fowler PW, Iqbal Z, Hunt M, Smith EG, Rathod P, Jarrett L, Matias D, Cirillo DM, Borroni E, Battaglia S, Ghodousi A, Spitaleri A, Cabibbe A, Tahseen S, Nilgiriwala K, Shah S, Rodrigues C, Kambli P, et al. (2019). Application of machine learning techniques to tuberculosis drug resistance analysis. *BIOINFORMATICS*, vol. 35, p. 2276-2282, ISSN: 1367-4803, doi: 10.1093/bioinformatics/bty949

20. Spitaleri A, Ghodousi A, Miotto P, Cirillo DM (2019). Whole genome sequencing in Mycobacterium tuberculosis. *ANNALS OF TRANSLATIONAL MEDICINE*, vol. 7, ISSN: 2305-5839, doi: 10.21037/atm.2019.07.28
21. Yang Y, Walker TM, Walker AS, Wilson DJ, Peto TEA, Crook DW, Shamout F, Zhu TT, Clifton DA, Arandjelovic I, Comas I, Farhat MR, Gao Q, Sintchenko V, van Soolingen D, Hoosdally S, Cruz ALG, Carter J, Grazian C, Earle SG, Kouchaki S, Fowler PW, Iqbal Z, Hunt M, Smith EG, Rathod P, Jarrett L, Matias D, Cirillo DM, Borroni E, et al. (2019). DeepAMR for predicting co-occurent resistance of Mycobacterium tuberculosis. *BIOINFORMATICS*, vol. 35, p. 3240-3249, ISSN: 1367-4803, doi: 10.1093/bioinformatics/btz067
22. Decherchi S, Bottegoni G, Spitaleri A, Rocchia W, Cavalli A (2018). Addendum to BiKi Life Sciences: A New Suite for Molecular Dynamics and Related Methods in Drug Discovery (vol 58, pg 219, 2018). *JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND MODELING*, vol. 58, p. 1721, ISSN: 1549-9596, doi: 10.1021/acs.jcim.8b00489
23. Decherchi S, Bottegoni G, Spitaleri A, Rocchia W, Cavalli A (2018). BiKi Life Sciences: A New Suite for Molecular Dynamics and Related Methods in Drug Discovery. *JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND MODELING*, vol. 58, p. 219-224, ISSN: 1549-9596, doi: 10.1021/acs.jcim.7b00680
24. Spitaleri A, Decherchi S, Cavalli A, Rocchia W (2018). Fast Dynamic Docking Guided by Adaptive Electrostatic Bias: The MD-Binding Approach. *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, vol. 14, p. 1727-1736, ISSN: 1549-9618, doi: 10.1021/acs.jctc.7b01088
25. Spitaleri A, Rocchia R (2018). Molecular dynamics-based approaches describing protein binding. ISBN: 9783527806836 , ISSN: 1432-4636, doi: 10.1002/9783527806836
26. Paissoni C, Ghitti M, Belvisi L, Spitaleri A, Musco G (2016). Metadynamics Simulations Rationalise the Conformational Effects Induced by N-Methylation of RGD Cyclic Hexapeptides. *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, ISSN: 0947-6539, doi: 10.1002/chem.201501196
27. Sana ME, Quilliam LA, Spitaleri A, Pezzoli L, Marchetti D, Lodrini C, Candiago E, Lincusso AR, Ferrazzi P, Iascone M (2016). A Novel HRAS Mutation Independently Contributes to Left Ventricular Hypertrophy in a Family with a Known MYH7 Mutation. *PLOS ONE*, vol. 11, ISSN: 1932-6203, doi: 10.1371/journal.pone.0168501
28. Spiliotopoulos D, Kastritis PL, Melquiond ASJ, Bonvin AMJJ, Musco G, Rocchia W, Spitaleri A* (2016). dMM-PBSA: A New HADDOCK Scoring Function for Protein-Peptide Docking. *FRONTIERS IN MOLECULAR BIOSCIENCES*, vol. 3, ISSN: 2296-889X, doi: 10.3389/fmolb.2016.00046
29. Cavalli A, Spitaleri A, Saladino G, Gervasio FL (2015). Investigating Drug-Target Association and Dissociation Mechanisms Using Metadynamics-Based Algorithms. *ACCOUNTS OF CHEMICAL RESEARCH*, vol. 48, p. 277-285, ISSN: 0001-4842, doi: 10.1021/ar500356n
30. Paissoni C, Ghitti M, Belvisi L, Spitaleri A, Musco G (2015). Metadynamics Simulations Rationalise the Conformational Effects Induced by N-Methylation of RGD Cyclic Hexapeptides. *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, vol. 21, p. 14165-14170, ISSN: 0947-6539, doi: 10.1002/chem.201501196
31. Paissoni C, Spiliotopoulos D, Musco G, Spitaleri A* (2015). GMXPBSA 2.1: A GROMACS tool to perform MM/PBSA and computational alanine scanning. *COMPUTER PHYSICS COMMUNICATIONS*, ISSN: 0010-4655, doi: 10.1016/j.cpc.2014.09.010
32. Cavalli A, Spitaleri A, Saladino G, Gervasio FL (2014). Investigating Drug-Target Association and Dissociation Mechanisms Using Metadynamics-Based Algorithms. *ACCOUNTS OF CHEMICAL RESEARCH*, ISSN: 0001-4842, doi: 10.1021/ar500356n
33. Ghitti M, Musco G, Spitaleri A (2014). NMR and Computational Methods in the Structural and Dynamic Characterization of Ligand-Receptor Interactions. *ADVANCES IN EXPERIMENTAL MEDICINE AND BIOLOGY*, vol. 805, p. 271-329, ISSN: 0065-2598, doi: 10.1007/978-3-319-02970-2_12
34. Paissoni C, Spiliotopoulos D, Musco G, Spitaleri A* (2014). GMXPBSA 2.0: A GROMACS tool to perform MM/PBSA and computational alanine scanning. *COMPUTER PHYSICS COMMUNICATIONS*, vol. 185, p. 2920-2929, ISSN: 0010-4655, doi: 10.1016/j.cpc.2014.06.019
35. Sana ME, Spitaleri A, Spiliotopoulos D, Pezzoli L, Preda L, Musco G, Ferrazzi P, Iascone M (2014). Identification of a Novel de Novo Deletion in RAF1 Associated With Biventricular Hypertrophy in Noonan Syndrome. *AMERICAN JOURNAL OF MEDICAL GENETICS. PART A*, vol. 164, p. 2069-2073, ISSN: 1552-4825, doi: 10.1002/ajmg.a.36588
36. Barbariga M, Curnis F, Spitaleri A, Andolfo A, Zucchelli C, Lazzaro M, Magnani G, Musco G, Corti A, Alessio M (2013). Oxidation-induced Structural Changes of Ceruloplasmin Foster NGR Motif Deamidation That Promotes Integrin Binding and Signaling. *JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY*, ISSN: 1083-351X, doi: 10.1074/jbc.M113.520981
37. Gaude E, Chignola F, Spiliotopoulos D, Spitaleri A, Ghitti A, Garcia-Manteiga JM, Mari S, Musco G (2013). muma, An R Package for Metabolomics Univariate and Multivariate Statistical Analysis. *CURRENT METABOLOMICS*, ISSN: 2213-2368, doi: 10.2174/2213235X11301020005

38. Ghitti M, Spitaleri A, Valentinis B, Mari S, Asperti C, Traversari C, Rizzardi GP, Musco G (2012). Molecular Dynamics Reveal that isoDGR-Containing Cyclopeptides Are True α v β 3 Antagonists Unable To Promote Integrin Allostery and Activation. *ANGEWANDTE CHEMIE. INTERNATIONAL EDITION*, vol. 51, p. 7702-7705, ISSN: 1433-7851, doi: 10.1002/anie.201202032
39. Hunter CA, McCabe JF, Spitaleri A (2012). Solvent effects of the structures of prenucleation aggregates of carbamazepine. *CRYSTENGCOMM*, vol. 14, p. 7115-7117, ISSN: 1466-8033, doi: 10.1039/c2ce25941a
40. Spiliotopoulos D, Spitaleri A*, Musco G (2012). Exploring PHD Fingers and H3K4me0 Interactions with Molecular Dynamics Simulations and Binding Free Energy Calculations: AIRE-PHD1, a Comparative Study. *PLOS ONE*, vol. 7, ISSN: 1932-6203, doi: 10.1371/journal.pone.0046902
41. Mari S, Invernizzi C, Spitaleri A, Alberici L, Ghitti M, Bordignon C, Traversari C, Rizzardi GP, Musco G (2011). 2D TR-NOESY Experiments interrogate and rank ligand-receptor interactions in living human cancer cells. *THE FEBS JOURNAL*, vol. 278, p. 219-220, ISSN: 1742-464X
42. Spitaleri A, Ghitti M, Mari S, Alberici L, Traversari C, Rizzardi GP, Musco G (2011). Use of Metadynamics in the Design of isoDGR-Based α nu β 3 Antagonists To Fine-Tune the Conformational Ensemble. *ANGEWANDTE CHEMIE. INTERNATIONAL EDITION*, vol. 50, p. 1832-1836, ISSN: 1433-7851, doi: 10.1002/anie.201007091
43. Mari S, Invernizzi C, Spitaleri A, Alberici L, Ghitti M, Bordignon C, Traversari C, Rizzardi GP, Musco G (2010). 2D TR-NOESY Experiments Interrogate and Rank Ligand-Receptor Interactions in Living Human Cancer Cells. *ANGEWANDTE CHEMIE. INTERNATIONAL EDITION*, vol. 49, p. 1071-1074, ISSN: 1433-7851, doi: 10.1002/anie.200905941
44. Wodarczyk C, Distefano G, Rowe I, Gaetani M, Bricoli B, Muorah M, Spitaleri A, Mannella V, Ricchiuto P, Pema M, Castelli M, Casanova AE, Mollica L, Banzi M, Boca M, Antignac C, Saunier S, Musco G, Boletta A (2010). Nephrocystin-1 Forms a Complex with Polycystin-1 via a Polyproline Motif/SH3 Domain Interaction and Regulates the Apoptotic Response in Mammals. *PLOS ONE*, vol. 5, ISSN: 1932-6203, doi: 10.1371/journal.pone.0012719
45. Chignola F, Gaetani M, Rebane A, Org T, Mollica L, Zucchelli C, Spitaleri A, Mannella V, Peterson P, Musco G (2009). The solution structure of the first PHD finger of autoimmune regulator in complex with non-modified histone H3 tail reveals the antagonistic role of H3R2 methylation. *NUCLEIC ACIDS RESEARCH*, vol. 37, p. 2951-2961, ISSN: 0305-1048, doi: 10.1093/nar/gkp166
46. Cioffi M, Hunter CA, Packer MJ, Spitaleri A (2008). Determination of protein-ligand binding modes using complexation-induced changes in H-1 NMR chemical shift. *JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY*, vol. 51, p. 2512-2517, ISSN: 0022-2623, doi: 10.1021/jm701194r
47. Spitaleri A, Mari S, Curnis F, Traversari C, Longhi R, Bordignon C, Corti A, Rizzardi GP, Musco G (2008). Structural basis for the interaction of isoDGR with the RGD-binding site of α v β 3 integrin. *THE JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY*, vol. 283, p. 19757-19768, ISSN: 0021-9258, doi: 10.1074/jbc.M710273200
48. Mollica L, De Marchis F, Spitaleri A, Dallacosta C, Pennacchini D, Zamai M, Agresti A, Trisciuglio L, Musco G, Bianchi ME (2007). Glycyrrhizin binds to high-mobility group box 1 protein and inhibits its cytokine activities. *CHEMISTRY & BIOLOGY*, vol. 14, p. 431-441, ISSN: 1074-5521, doi: 10.1016/j.chembiol.2007.03.007
49. Spitaleri A, Mari S, Curnis F, Traversari C, Bordignon C, Corti A, Rizzardi GP, Musco G (2007). Structural basis for L-isoDGR stereospecific recognition of α v β 3. *MOLECULAR CANCER THERAPEUTICS*, vol. 6, p. 3341S, ISSN: 1535-7163
50. Hunter CA, Spitaleri A, Tomas S (2005). Tailbiter: a new amide foldamer. *CHEMICAL COMMUNICATIONS*, p. 3691-3693, ISSN: 1359-7345, doi: 10.1039/b506093a
51. Spitaleri A, Hunter CA, McCabe JF, Packer MJ, Cockroft SL (2004). A H-1 NMR study of crystal nucleation in solution. *CRYSTENGCOMM*, vol. 6, p. 489-493, ISSN: 1466-8033, doi: 10.1039/b407163h
52. Spitaleri A, Pertici P, Scalera N, Vitulli G, Hoang M, Turney TW, Gleria M (2003). Supported ruthenium nanoparticles on polyorganophosphazenes: preparation, structural and catalytic studies. *INORGANICA CHIMICA ACTA*, vol. 352, p. 61-71, ISSN: 0020-1693, doi: 10.1016/S0020-1693(03)00141-5
53. Marzi E, Spitaleri A, Mongin F, Schlosser M (2002). Fluoro- or trifluoromethyl-substituted benzyl and phenethyl alcohols: Substrates for metal-mediated site-selective functionalization. *EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*, vol. 2002, p. 2508-2517, ISSN: 1434-193X, doi: 10.1002/1099-0690(200208)2002:15<2508::AID-EJOC2508>3.0.CO;2-C
54. Marzi E, Spitaleri A, Mongin F, Schlosser M (2002). Fluoro- or trifluoromethyl-substituted benzyl and phenethyl alcohols: Substrates for metal-mediated site-selective functionalization. *EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*, vol. 2002, p. 2508-2517, ISSN: 1434-193X, doi

Data

17/02/2023

Luogo

Treviglio