



**AL MAGNIFICO RETTORE  
DELL'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MILANO**

**COD. ID:**

Il sottoscritto chiede di essere ammesso a partecipare alla selezione pubblica, per titoli ed esami, per il conferimento di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche

Responsabile scientifico: **Professor Alessandro Contini**

## **CURRICULUM VITAE**

### INFORMAZIONI PERSONALI

<b>Cognome</b>	Coppa
<b>Nome</b>	Crescenzo

### OCCUPAZIONE ATTUALE

<b>Incarico</b>	<b>Struttura</b>
Assegnista di tipo B	Università degli Studi di Milano

### ISTRUZIONE E FORMAZIONE

<b>Titolo</b>	<b>Corso di studi</b>	<b>Università</b>	<b>anno conseguimento titolo</b>
Laurea Magistrale o equivalente	Biotechnologie del Farmaco	Università degli studi di Milano	2017
Specializzazione	-	-	-
Dottorato Di Ricerca	Chimica	Università degli studi di Milano	2022
Master	-	-	-
Diploma Di Specializzazione Medica	-	-	-
Diploma Di Specializzazione Europea	-	-	-
Altro	-	-	-

### ISCRIZIONE AD ORDINI PROFESSIONALI

<b>Data iscrizione</b>	<b>Ordine</b>	<b>Città</b>
-	-	-



## LINGUE STRANIERE CONOSCIUTE

lingue	livello di conoscenza
Inglese	B2

## PREMI, RICONOSCIMENTI E BORSE DI STUDIO

anno	Descrizione premio
2017	Vincitore di una borsa di studio per giovani promettenti finanziata da fondazione Cariplo presso l'Università degli studi di Milano
2018-2021	Vincitore di una borsa di studio per il Dottorato di ricerca in Chimica
2021	Vincitore di una borsa di studio finanziata da fondazione Telethon presso il dipartimento di Biotecnologie Molecolari e Scienze per la Salute dell'università degli Studi di Torino
2022	Vincitore di un assegno di ricerca di tipo B presso il dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'università degli Studi di Milano

## ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA

### descrizione dell'attività

**04/2016-05/2017:** Tesista magistrale presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università degli Studi di Milano

**06/2017-12/2017:** Volontario frequentatore presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università degli Studi di Milano

**01/2018-09/2018:** Borsista finanziato da Cariplo presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano

**10/2018-9/2021:** Dottorato di ricerca in Chimica presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Milano

**10/2021-03/2022:** Borsista presso il Dipartimento di Biotecnologie Molecolari e Scienze per la Salute dell'Università degli Studi di Torino

**04/2022-in corso:** Assegnista di tipo B presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'università degli Studi di Milano

Il mio percorso nell'ambito della ricerca è iniziato con lo svolgimento della tesi magistrale, durante il quale ho studiato il recettore RAGE (Receptor Of Advanced Glycation Endproduct) e il modo in cui i prodotti di glicazione avanzata interagiscono con esso, sviluppando una strategia di docking proteina-proteina alternativa, sfruttando il programma GRAMM integrato in VegaZZ, utilizzando tecniche di dinamica molecolare (MD), tramite NAMD, e identificando potenziali inibitori dell'interazione.

Durante il periodo da volontario frequentatore ho cercato di migliorare il metodo di docking sviluppato in tesi e parallelamente ho lavorato sull'identificazione di potenziali inibitori dell'enzima carnosinasi attraverso simulazioni di docking, eseguite con il tool PLANTS.



Durante il periodo di borsa di studio per giovani promettenti finanziata da Cariplo, ho lavorato su un progetto finalizzato a determinare come cambia la velocità di reazione dell'enzima gamma-glutamyl transferasi in seguito a mutazioni puntiformi. Il lavoro è stato svolto sfruttando approcci di MD, utilizzando GROMACS, e Quanto Meccanica /Meccanica Molecolare (QM/MM) utilizzando GAUSSIAN. Parallelamente, ho applicato anche degli approcci di docking molecolare (AUTODOCK) per determinare la posizione del glutammato, substrato dell'enzima, nella cavità enzimatica.

Il progetto di ricerca che ho svolto durante il dottorato di ricerca presso il Dipartimento di Chimica era incentrato sulla persistenza, una variante fenotipica batterica temporaneamente tollerante agli antibiotici. In particolare, mi sono concentrato sulla famiglia di enzimi RelA/SpoT homolog (RSH) per identificare potenziali inibitori della sintesi dei nucleotidi iperfosforilati, quali guanosina tetra e pentafosfato ((p)ppGpp). Il comportamento dinamico della 'long RSH' di *Streptococcus equisimilis*, uno degli enzimi appartenenti alla superfamiglia RSH, è stato studiato tramite simulazioni di MD, usando il software AMBER, identificando un potenziale hotspot per la selezione di ligandi. Successivamente, tramite virtual screening, espansione della libreria, MD e design di composti, sfruttando sia tool presenti nel package Schrödinger che tool online, sono stati identificati dei chemotipi affini al target. In seguito, questi chemotipi sono stati modificati per ottenere potenziali inibitori testati sia in silico, tramite docking (GLIDE) e MD (DESMOND), sia in vitro con risultati promettenti.

Durante il periodo di borsa di studio finanziata da fondazione Telethon e dal titolo successivo al dottorato di ricerca, mi sono occupato di studiare l'interazione tra le proteine Rho GTPasi e varie GAP (GTPase accelerated protein) per lo sviluppo di peptidi inibitori di questa interazione per contrastare la disabilità intellettiva. L'utilizzo di homology modeling, sfruttando il software MOE, e della MD accelerata (aMD), utilizzando AMBER, ha permesso di identificare dei peptidi che potrebbero essere usati a tale scopo. Durante l'assegno sono stato co-supervisor di diversi tesisti.

Nel periodo di assegno di ricerca di tipo B, ho continuato a lavorare sulla disabilità intellettiva andando a modificare i peptidi precedentemente disegnati studiandone il comportamento anche su altre GAP. Inoltre ho lavorato nello sviluppo di peptidi e di piccole molecole nel tentativo di legare la SPIKE di SARS-CoV-2 e di inibire l'attività di RNA-dependent RNA polymerase (RdRp) in collaborazione con l'università degli Studi di Firenze e l'università degli Studi di Parma. Contemporaneamente ho studiato quale combinazione di forze field e modello di solvatazione fosse ideale per il folding di peptidi. Ho anche sviluppato un protocollo che combina docking e metadinamica per identificare il migliore metodo di binding di ciclopeptidi. Ho anche studiato e sviluppato protocolli unici per vari metodi di enhanced sampling (Pep-GaMD, PPI-GaMD, Lig-GaMD). Durante l'assegno sono stato co-supervisor di diversi tesisti.

## **Skill computazionali:**

**Software packages:** AMBER, Schrödinger, MOE, VEGAZZ

**Software di docking:** PLANTS, GLIDE, Autodock, GRAMM

**Software di MD e QM:** Amber, Desmond, Gromacs, NAMD, Gaussian

**Linguaggi di programmazione:** Bash (basic), Python (basic), Java (cenni)

**Enhanced Sampling Methods:** aMD, GaMD, Pep-GaMD, PPI-GaMD, Lig-GaMD, REMD



**Ambienti operativi:** Linux/Unix, Windows

## ATTIVITÀ PROGETTUALE

Anno	Progetto
2018	<b>Titolo:</b> “Value-added products through biocatalysis. Tailored gamma-glutamyltranspeptidates (tailGluTran)” <b>Ente finanziatore:</b> Fondazione Cariplo <b>Ruolo:</b> Partecipante
2018-2021	<b>Titolo:</b> ERadicating CHRONic infectiON (ERACHRON) <b>Ente finanziatore:</b> European Research Council (ERC) <b>Ruolo:</b> Partecipante
2021-2022	<b>Titolo:</b> “Structure-based design of inhibitors of the protein-protein interaction between Rac1 and GAPs” <b>Ente Finanziatore:</b> Fondazione Telethon <b>Ruolo:</b> Partecipante

## TITOLARITÀ DI BREVETTI

Brevetto
-

## CONGRESSI, CONVEGNI E SEMINARI

Data	Titolo	Sede
30/05/2023-02/06/2023	UGM & Conference 2023	Monaco, Germania
20/04/2021	From Information to Function: a Systems biology view of the processes of life - A tribute to Anna Tramontano	online
21/12/2020	Virtual Symposium on Chemical Theory and Computation VS-CTC	online
18/06/2020	Accurate in silico prediction of protein thermostability with free energy perturbation	online
13/09/2019	New approaches in Molecular modelling workshop by SCHRODINGER	Milano



28/03/2019	Computationally Driven Drug Discovery 6th meeting	Roma
------------	---	------

## PUBBLICAZIONI

<b>Libri</b>
-

<b>Articoli su riviste</b>
Novel Polymyxin-Inspired Peptidomimetics Targeting the SARS-CoV-2 Spike:hACE2 Interface International Journal of Molecular Sciences, 2023
Accelerated Molecular Dynamics for Peptide Folding: Benchmarking Different Combinations of Force Fields and Explicit Solvent Models, . J Chem Inf Model. 2023
Effect of Fc core fucosylation and light chain isotype on IgG1 flexibility, Commun Biol. 2023
Identification of a short ACE2-derived stapled peptide targeting the SARS-CoV-2 spike protein. Eur J Med Chem, 2023
New Chemotypes for the Inhibition of (p)ppGpp Synthesis in the Quest for New Antimicrobial Compounds. Molecules, 2022
Advanced lipoxidation end products (ALEs) as RAGE binders: Mass spectrometric and computational studies to explain the reasons why, REDOX BIOLOGY, Elsevier, 2019
Development and validation of a sensitive LC-MS/MS assay for the quantification of anserine in human plasma and urine and its application to pharmacokinetic study, AMINO ACIDS, Springer, 2019
Data from docking simulations to develop an efficient strategy able to evaluate the interactions between RAGE and MDA-induced albumin adducts, DATA IN BRIEF, Elsevier, 2017

<b>Atti di convegni</b>
-

## ALTRE INFORMAZIONI

-
---

Le dichiarazioni rese nel presente curriculum sono da ritenersi rilasciate ai sensi degli artt. 46 e 47 del DPR n. 445/2000.

Il presente curriculum, non contiene dati sensibili e dati giudiziari di cui all'art. 4, comma 1, lettere d) ed e) del D.Lgs. 30.6.2003 n. 196.

**RICORDIAMO** che i curricula **SARANNO RESI PUBBLICI sul sito di Ateneo** e pertanto si prega di non inserire dati sensibili e personali. Il presente modello è già pre-costruito per soddisfare la necessità di pubblicazione senza dati sensibili.

Si prega pertanto di **NON FIRMARE** il presente modello.

Luogo e data: Milano, 02/02/2024