



Novembre 2000-Ottobre 2004:	Titolare di assegno di ricerca presso il Dipartimento di Scienze Fisiche ed Astronomiche di Palermo, per lo svolgimento d'attività di ricerca sul tema: " <i>Studio della dinamica di proteine in relazione alla rigidità della matrice estrema</i> ".
Dicembre 2004:	Vincitore della Procedura di Valutazione Comparativa per la copertura di n. 1 posto di Ricercatore Universitario per il SSD FIS07 - Fisica Applicata (a Beni Culturali, Ambientali, Biologia e Medicina), presso la Facoltà di Scienze FF.MM.NN, D.R n. 6524 del 30-12-2004.
Dal Dicembre 2007	Ricercatore confermato per il settore scientifico-disciplinare FIS/07, D.D. n. 2735 del 29-05-2008, con validità a partire dal 30-12-2007.
Dal Settembre 2009 al Settembre 2010	In congedo per motivi di studio e ricerca, ai sensi dell'art.8 della Legge 349/58, D.D. n. 4764 del 11/09/2009.
Dal Settembre 2009 al Settembre 2010	<i>Research fellowship</i> presso University College of Dublin, School of Physics.
Dal Settembre 2010 al Agosto 2011	In congedo per motivi di studio e ricerca, ai sensi dell'art.8 della Legge 349/58, D.D. n. 3232 del 05/10/2010
Dal Settembre 2010 al Agosto 2011	<i>Research fellowship</i> presso University College of Dublin, School of Physics.
Dal Settembre 2011 al Novembre 2013	Visiting Senior Lecturer presso University College of Dublin, School of Physics
Dal Ottobre 2016	Abilitazione Scientifica Nazionale per il Settore Concorsuale 02/B3 (attualmente 02/D1), Area 02-II Fascia. Periodo di idoneità: 05/10/2016-05/10/2022

## Attività istituzionali/Commissioni

E' componente della *commissione Didattica del Dipartimento di Fisica e Chimica*, Università di Palermo

E' membro docente della *commissione paritetica del corso di laurea LM Biologia Molecolare e della Salute*, Università di Palermo

E' componente del *collegio dei docenti della scuola di Dottorato in Tecnologie e scienze per la salute dell'uomo*, ciclo XXXIII, A.A. 2017/18, Università di Palermo

Responsabile del "*Laboratorio di Biofisica Computazionale*" presso il Dipartimento di Fisica e Chimica, Università di Palermo.

Responsabile del "*Laboratorio didattico di informatica per i sistemi biologici*", presso il dipartimento di Fisica e Chimica, Università di Palermo

E' stata componente del *Consiglio di Facoltà di Scienze MM. FF. NN* dal 2004 al 2013; negli anni 2006-2008 come *rappresentante dei ricercatori e assistenti r.e.*

E' stata componente della *Commissione Consultiva del Senato Accademico per l'Area 02 Scienze Fisiche* in qualità di *rappresentante dei ricercatori*, 2007-2009

E' stata componente del collegio dei docenti della scuola di Dottorato in *Medicina Molecolare e Biotecnologie*, curriculum in: *Biofisica Molecolare e Bio-Imaging*, ciclo XXIX, A. A. 2013/14

E' stata componente del collegio dei docenti della scuola di Dottorato in *Fisica*, ciclo XXVI, A.A. 2012/13

E' componente di commissione di Laurea triennale in Scienze Fisiche e Laurea magistrale in Fisica.

E' stata componente di commissione di Laurea in Scienze Biologiche V.O. e N.O.  
E' stata componente di commissione per l'attribuzione di assegni di ricerca presso il Dipartimento di Scienze Fisiche ed Astronomiche, Università degli Studi di Palermo (2006,2008)  
E' stata membro supplente della commissione giudicatrice per la valutazione dell'esame finale per il conseguimento del titolo di dottore di ricerca in INGEGNERIA FISICA XXI ciclo, Università di Catania, 2008  
E' stata componente di commissione per le prove di accesso alla laurea triennale in Scienze Biologiche (A.A 2005/2006; 2006/2007; 2007/2008; 2008/2009).  
E' stata componente di commissione per le prove di accesso alla laurea triennale in Scienze Fisiche, Università degli Studi di Palermo (A.A 2012/2013).  
E' stata componente della commissione del CCCS in Scienze Biologiche per la Proposta di costituzione in rete tra la Facoltà di Scienze MM. FF. NN. dell'Università degli Studi di Palermo, il Liceo Scientifico Statale "Benedetto Croce" di Palermo e l'Educandato Statale Maria Adelaide di Palermo (Liceo Classico), per un progetto dal titolo: "La conoscenza delle leggi della natura per una cultura della legalità consapevole.", 2006.  
E' stata componente della commissione elettorale per le elezioni del Coordinatore del Consiglio Interclasse in Scienze Fisiche per il triennio 2013/2016

## **Incarichi di revisore e Consulenze**

*Revisore MIUR*, Settori dell' European Research Council: PE3\_19, PE4\_13, LS1-6, LS2\_11, LS2\_14 (Bando PRIN 2009, Bando FIRB 2013, Bando SIR 2014, Bando Montalcini 2015, Bando Joint Projects-UNIVR 2017)

Iscritta all'albo REPRISE - *Register of Expert Peer Reviewers for Italian Scientific Evaluation*

*Revisore MIUR* per la VQR 2011-14

*Revisore di Progetti di calcolo ad alte prestazioni per CINECA-Italian SuperComputing Resource Allocation - ISCRA*

*Revisore di Progetti di calcolo ad alte prestazioni per conto del consorzio PRACE, Partnerships for Advanced Computing in Europe, pan-European Research Infrastructure for HPC*

*Membro del Prioritization Panel-PRACE 9th Regular Call, Panel of Biochemistry, Bioinformatics and Life sciences, Bruxelles, Luglio 2014*

*Scientific Host* per conto di HPC-EUROPA3-<http://www.hpc-europa.org/>

## **Attività organizzative**

E' stata componente del comitato organizzatore locale del "XIII European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules", Palermo 28 Agosto-2 Settembre 2009.

E' stata componente del comitato organizzatore del "Five pieces and a do in computational physics, chemistry, biology, mathematics and engineering" Roma 18-20 Dicembre 2013  
<http://www.phys.uniroma1.it/fisica/archivionotizie/five-pieces-and-do-computational>

E' stata componente del comitato organizzatore del "3rd Conference on Frontiers in Water Biophysics(FWB)" Erice 7-12 Settembre 2015,  
<http://www.waterbiophysics.eu/en/Home/Welcome-to-Frontiers-in-Water-Biophysics-2015/>

E' stata componente del comitato organizzatore del "Italian National Conference on Condensed Matter Physics, FISMAT2015", Palermo 28 Settembre-2 ottobre 2015, Co-organizzatore delle tre sezioni parallele "Computational Biophysics I, II, III", <http://eventi.cnism.it/fismat2015>

E' stata componente del comitato organizzatore del "International Workshop on the Structure and Dynamics of Supercooled Water and Other Glassy Materials" Palermo 10-13 Ottobre 2015,  
<https://sites.google.com/site/chenunipa/>

E' stata organizzatore dell'evento dimostrativo per le scuole "L'acqua: il solvente naturale e le sue proprietà uniche" nell'ambito della manifestazione "Esperienza Insegna", Palermo, 29 Febbraio, 2016.

E' stata componente del comitato organizzatore del "3rd Course of the ERICE School "NEUTRON SCIENCE AND INSTRUMENTATION" , Erice, 22-31 Luglio 2016  
[http://sons.uniroma2.it/ericeneutronschool/wp-content/uploads/2016/05/FLYER\\_3rd-Course-2016\\_07\\_20.pdf](http://sons.uniroma2.it/ericeneutronschool/wp-content/uploads/2016/05/FLYER_3rd-Course-2016_07_20.pdf)

E' stata componente del comitato organizzatore del "4rd Conference on Frontiers in Water

Biophysics (FWB)" Erice, 22-27 Maggio 2017

<http://www.waterbiophysics.eu/en/Home/Welcome-to-Frontiers-in-Water-Biophysics-2017/>

E' stata organizzatore dell'evento dimostrativo per le scuole "L'acqua: il solvente naturale e le sue proprietà uniche" nell'ambito della manifestazione "Esperienza Insegna", Palermo, 15 Febbraio, 2017.

E' stata organizzatore dell'evento dimostrativo per le scuole "La fisica e la chimica computazionale nel tempo: l'esperienza palermitana" nell'ambito della manifestazione "Esperienza Insegna", Palermo, 26 Febbraio, 2018.

E' stata componente del comitato organizzatore della scuola internazionale "Water and water systems-The hydrophobic effect", Erice, 4-11 Luglio 2018

<http://ww2.unime.it/crsc/erice2018/index.html>

E' attualmente componente del comitato organizzatore del "5th Conference on Frontiers in Water Biophysics", <http://www.waterbiophysics.eu/en/Home/Welcome-to-Frontiers-in-Water-Biophysics/>

## Attività Didattica

### A.A. 2001/2002:

Contratto d'insegnamento della disciplina "Elementi di Fisica" (5 CFU), corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Facoltà di Scienze MM.FF.NN., Università degli Studi di Palermo. Attività seminariale di supporto al corso di Biofisica, Laurea Specialistica in Fisica, sul tema:

"Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dai sistemi atomici semplici alle biomolecole".

### A.A. 2002/2003:

Contratto d'insegnamento della disciplina "Elementi di Fisica" (5 CFU), corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Facoltà di Scienze MM.FF.NN., Università degli Studi di Palermo

### A.A. 2003/2004:

Contratto d'insegnamento della disciplina "Elementi di Fisica" (5 CFU), corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Facoltà di Scienze MM.FF.NN., Università degli Studi di Palermo

### A.A. 2004/2005:

Affidamento incarico di docenza della disciplina "Elementi di Fisica" (5+1 CFU), corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso base, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso sdoppiato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Attività seminariale (8 ore) di supporto al corso di Biofisica Molecolare, Laurea specialistica in Fisica, conducendo tre seminari sul tema: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dai sistemi atomici semplici alle biomolecole".

### A.A. 2005/2006:

Incarico di supplenza della disciplina "Elementi di Fisica" (5+1 CFU) corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso base, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso sdoppiato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Attività seminariale (8 ore) di supporto al corso di Fisica dei Biosistemi, Laurea specialistica in Fisica, conducendo tre seminari sul tema: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dai sistemi atomici semplici alle biomolecole".

### A.A. 2006/2007:

Incarico di supplenza della disciplina "Elementi di Fisica" (5+1 CFU) corso sdoppiato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso base, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Attività seminariale (6 ore) di supporto al corso di Dinamica delle Proteine, Laurea triennale in Scienze Biologiche, sul tema: "La comprensione della struttura/dinamica/funzione delle proteine, al livello atomico: LE SIMULAZIONI AL CALCOLATORE".

Attività seminariale (12 ore) a supporto al corso di Fisica dei Biosistemi, Laurea specialistica in

Fisica, sul tema: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dai sistemi atomici semplici alle biomolecole".

Attività di tutoraggio di supporto al corso di Proprieta' Strutturali della Materia Biologica, Laurea specialistica in Fisica.

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi, responsabile: Prof. L Cordone

#### **A.A. 2007/2008**

Incarico di supplenza della disciplina "Elementi di Fisica" (5+1 CFU) corso sdoppiato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche.

Corso di esercitazioni (16 ore) per il corso di "Elementi di Fisica", corso triplicato, Corso di Laurea in Scienze Biologiche

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi, responsabile: Prof. L Cordone

#### **A.A. 2008/2009**

Corso di esercitazioni (assistenza in laboratorio) per il corso di "Laboratorio di Fisica IV" (2 CFU, 32 ore), Corso di Laurea Triennale in Scienze Fisiche, responsabile: Prof. A. Emanuele.

Corso di esercitazioni (assistenza in laboratorio, 16 ore) per il corso di "Laboratorio di Biofisica Laurea specialistica in Fisica responsabile: Prof. A. Emanuele

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi, responsabile: Prof. L Cordone

#### **A.A.2009-2010 e A.A. 2010-2011**

Congedo per motivi di studio e ricerca presso University College of Dublin, School of Physics.

Co-supervisor di tesi di dottorato presso l'Advanced Molecular Simulation Research Laboratory, University College of Dublin, School of Physics

#### **A.A. 2011-2012**

Corso di Fisica dei Biosistemi (5+1 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi, responsabile: Prof. A. Emanuele

#### **A.A. 2012-2013**

Corso di Fisica dei Biosistemi (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi, responsabile: Prof. A. Emanuele

#### **A.A. 2013-2014**

Corso di Fisica dei Biosistemi (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi

#### **A.A. 2014-2015**

Corso di Fisica dei Biosistemi (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi

#### **A.A. 2015-2016**

Corso di Fisica dei Biosistemi (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso specialistico (30 ore) per la Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica: "Metodi di simulazione di Dinamica Molecolare: dagli algoritmi alle applicazioni", per gli allievi dell'indirizzo di Fisica dei Biosistemi

#### **A.A. 2016-2017**

Corso di Fisica dei Biosistemi (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso di Elementi di Biofisica (6 CFU), per il corso di Laurea Specialistica in Biologia Cellulare e Molecolare.

#### **A.A. 2017-2018**

Corso di Fisica dei Biosistemi (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso di Elementi di Biofisica (6 CFU), per il corso di Laurea Specialistica in Biologia Cellulare e Molecolare.

Attività seminariale (2 ore) a supporto al corso di *Biofisica e Biostrumentazione*, Laurea triennale in Biotecnologie, sul tema: “*La biofisica computazionale*”.

#### **A.A 2018-2019**

Corso di *Fisica dei Biosistemi* (4+2 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso di *Elementi di Biofisica* (5+1 CFU), per il corso di Laurea Specialistica in Biologia Cellulare e Molecolare.

Corso di *Fisica Computazionale con Laboratorio* (4+2), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

#### **A.A 2019-2020**

Modulo del corso di *Fisica dei Biosistemi* con Laboratorio (3 CFU), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

Corso di *Elementi di Biofisica* (5+1 CFU), per il corso di Laurea Specialistica in Biologia Cellulare e Molecolare.

Corso di *Fisica Computazionale con Laboratorio* (4+2), per il corso di Laurea Magistrale in Fisica.

#### **Partecipazioni a commissioni per gli esami di profitto dei seguenti corsi:**

*Fisica*, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Palermo;

*Fisica con Esercitazioni*, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Palermo;

*Fisica con Esercitazioni*, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Trapani;

*Elementi di Fisica con Esercitazioni*, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Palermo;

*Elementi di Fisica*, Corso di Laurea in Biologia Marina, Trapani;

*Fisica e Chimica Fisica*, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Palermo;

*Fisica e Chimica Fisica*, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Trapani;

*Fisica*, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Polo di Caltanissetta;

*Fisica*, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Termini Imerese;

*Laboratorio di Fisica*, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Palermo;

*Laboratorio di Fisica*, Corso di Laurea in Biologia Marina, Trapani

*Elementi di Fisica Applicata*, Corso di Laurea in Scienze Biologiche, Polo di Caltanissetta;

*Elementi di Biofisica*, Laurea Specialistica in Biologia Cellulare e Molecolare, Palermo;

*Elementi di Biofisica*, Laurea Magistrale in Biologia Molecolare e della Salute, Palermo;

*Biofisica*, Laurea Specialistica in Biologia Cellulare e Molecolare, Palermo;

*Fisica*, Corso di Laurea in Scienze Geologiche;

*Biofisica e Biostrumentazione*, Corso di Laurea in Biotecnologie, Palermo;

*Biofisica e Biostrumentazione con esercitazioni*, Corso di Laurea in Biotecnologie, Palermo;

*Fisica Applicata*, corso di Laurea in Odontoiatria e Protesi Dentaria;

*Fisica dei Biosistemi*, Corso di Laurea Magistrale in Fisica;

*Biofisica con Laboratorio*, Corso di Laurea Magistrale in Fisica;

*Fisica dei sistemi complessi*, Corso di Laurea Magistrale in Fisica;

*Laboratorio di Biofisica I*, Corso di Laurea Specialistica in Fisica;

*Laboratorio di Fisica IV*, Laurea Triennale Scienze Fisiche;

*Informatica e programmazione*, Laurea Triennale Scienze Fisiche;

E' stata correlatore di tesi di laurea di primo livello, Laurea in Fisica (A.A: 2005/2006);

“*Applicazione del metodo di scaling multidimensionale alla ricerca di stati intermedi in una simulazione di unfoldin di beta-lactoglobulina*”, studente: Nicolo' lo Piparo

E' stata relatore di tesi di laurea Magistrale, Laurea in Fisica (A. 2013/2014): “*Studio sperimentale e modello computazionale degli effetti della malattia di Alzheimer sui neuroni piramidali CA1 dell'ippocampo*”, studente: Sonia Ruggeri

E' stata Co-supervisor di tesi di dottorato presso l'*Advanced Molecular Simulation Research Laboratory*, University College of Dublin, School of Physics (2010/2013) “*Large-scale conformational changes in acetylcholine-binding protein*”, studente: Zeynab Hosseini.

E' stata tutor universitario del tirocinio svolto dallo studente Antonino Madonia presso l' IBF-CNR Palermo su: “*Studio di Neuroserpina Tramite Spettroscopia di Dicroismo Circolare*”, 25-29 Luglio 2006.

E' stata revisore esterno della tesi di Dottorato: “*Slow Dynamics of Supercooled Water in Biological and Glass Forming Solutions*” della Dr. Gaia Camisasca, Dottorato in Fisica – Università di Roma 3, Ciclo XXIX, Novembre 2016

E' stata revisore esterno della tesi di Dottorato: “*Mechanistic Insights into the effect of trehalose on*

*stabilization and aggregation of proteins*”, Ms Nadhi Katyal, IIT New Delhi, India, Agosto 2018.

## Principali linee di ricerca

Proprietà strutturali e dinamiche di acqua pura e soluzioni acquose, doppi strati lipidici, matrici di saccaridi; struttura-funzione-dinamica di proteine solubili e di membrana; interazione proteina solvente, interazione proteina-legante; interazione proteina/RNA. Sviluppo di force field per leganti; proprietà strutturali ed elettroniche di modelli di fotorecettori biologici.

L'attività di ricerca è condotta principalmente con approcci computazionali attraverso calcolo ad alte prestazioni (HPC): homology modelling, calcoli ab initio, simulazioni Monte Carlo e di Dinamica Molecolare di equilibrio e non equilibrio; metodi avanzati di campionamento in Dinamica Molecolare per lo studio di eventi rari; calcoli di energia libera; metodi di bioinformatica.

## Responsabilità di progetti di ricerca nazionali ed internazionali

-Progetto di Supercalcolo presso il centro di calcolo *Irish Center for High-End Computing* - ICHEC, [www.ichec.ie](http://www.ichec.ie), classe C, 25000 ore-nodo: *”Large Scale Conformational Transitions In Ligand Gated Ion Channels Benchmarking”* Aprile 2010-Aprile 2011

-Progetto di Supercalcolo presso il centro di calcolo ICHEC, classe C, 25000 ore-nodo: *”Kinetics of geminate recombination of nitric oxide in myoglobin mutants in water, under continuous photo-illumination, with Non Equilibrium Molecular Dynamics”*, Settembre 2010-Settembre 2011

-Progetto di Supercalcolo presso il centro di calcolo ICHEC, classe A, 958.000 ore-nodo: *”Large Scale Conformational Transitions In Ligand Gated Ion Channels”*, Settembre 2010-Settembre 2013, peer reviewed

-Progetto di Supercalcolo DEISA-DECI tier-1, PRACE-Partnership for Advanced Computing in Europe, presso centro di calcolo ICHEC, LGICTAMD, 1020000 ore-nodo, Novembre 2011-Ottobre 2013, peer reviewed

-Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe B, presso il CINECA, *”Large scale motions in models of human nicotinic receptors – LSMNICO”*, 4000000 ore-nodo, Marzo 2013-Marzo 2014, peer reviewed

-Progetto di supercalcolo presso il centro di calcolo ICHEC, classe C, 60000 ore-nodo: *”Determination of the free energy difference between two conformations of the trans-membrane n-acetylcholine receptor beta-subunit”*, Aprile 2014-marzo 2015

-Progetto di Supercalcolo presso il centro di calcolo ICHEC, classe B, 800000 ore-nodo: *”A full atomistic computational study of the active and inactive states of the human  $\alpha 7$  nicotinic receptor.”*, Marzo 2016-Settembre 2017, peer reviewed

-Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe C, presso il CINECA, *”CLOSINICO-A full atomistic computational study of the closed state of the human alpha7 nicotinic receptor”*, 1000000 ore nodo, Aprile 2016-Gennaio 2017

-Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe B, presso il CINECA, *”A full atomistic computational study of the ion permeation in the human alpha7 nicotinic receptor-IONLGIC”*, 10000000 ore nodo, Luglio 2016-Novembre 2017, peer reviewed

-Progetto di Supercalcolo DECI- PRACE- Partnership for Advanced Computing in Europe, tier-1, presso Poznan Supercomputing and Networking Center (PSNC), *”Molecular dynamics study of ion permeation in wild-type and mutants of the human alpha7 nicotinic receptor-MDNICO”*, 2940000 ore-nodo, Luglio 2017-Luglio 2018, peer reviewed

-Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe C, presso il CINECA, *”IONLOB Thermodynamics and Kinetics of single ion permeation in human alpha7 nicotinic receptor bound to partial agonist lobeline”*, 200000 ore nodo, Ottobre 2018-Luglio 2019

-Scientific Host per il progetto: *HPC Europa 3*: *”Transnational Access Programme for a Pan-European Network of HPC Research Infrastructures and Laboratories for scientific computing”* <http://www.hpc-europa.org/>, anni 2017-2021

## Partecipazione a progetti di ricerca nazionali ed internazionali

Progetto INFM- Progetto Sud *”Il Trealosio come agente stabilizzante di biostrutture”*, responsabile Prof. Lorenzo Cordone

Prin 2005 *Proprietà Dinamiche Strutturali e Funzionali di Proteine in Sistemi Non-Liquidi Contenenti Acqua Residua: Accoppiamento con la Matrice Esterna*, anni 2005-2007, responsabile locale e nazionale Prof. L. Cordone

Prin 2008 *Struttura-dinamica-funzione di biomolecole in sistemi lontani dall'idealità termodinamica*, anni 2009-2011, responsabile locale e nazionale Prof. L. Cordone.

Progetto su fondi di ateneo (ex 60%), "Struttura della Materia Biologica" (codice ORPA042212), responsabile Prof. A. Cupane, anni 2004, 2005,2006,2007,2008

Progetto su fondi di ateneo, FFR 2012/2013, responsabile Dr. M. Levantino

Collaboratore scientifico, workpackage "*Biophysics: Molecular Dynamics study of the allosteric transition in Hemoglobin and ligand binding in Myoglobin*", del progetto della Science Foundation of Ireland Project: SFI-PI *Advanced Molecular Simulation: applications and methodological advances across biology, ICT and nano materials, and energy in the environment*, SFI Grant No. 08-IN.1- I1869 sviluppato presso lo University College Dublin, anni 2009-2013, responsabile Prof. Giovanni Ciccotti

Progetto di Supercalcolo CINECA/INFM 2005 n 432 "*Molecular Dynamics simulations of carbonmonoxy-myoglobin in water-sugar systems*", anno 2005, responsabile Prof. L. Cordone.

PI2S2: Progetto per l'Imprementazione e lo Sviluppo di una e-Infrastruttura in Sicilia basata sul paradigma della GRID, attività WP4/4.8: *Definizione, progettazione e realizzazione del software necessario all'esecuzione delle applicazioni di Bio-Informatica su Grid*, anni 2006-2008

Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe C, presso CINECA, "*Enhanced sampling of conformational space and reconstruction of free energy landscape of RNase A protein by Temperature-Accelerated Molecular Dynamics and Multiple Replica Repulsion Technique-ESCSRNAS*", 60000 ore nodo, Maggio 2014, responsabile Antonio Deiana

Progetto di Supercalcolo PRACE- Partnership for Advanced Computing in Europe, tier-0, presso CINECA, "*3DBULB*", Marzo 2015-Marzo 2016, responsabile Michele Migliore, peer reviewed

-Progetto di Supercalcolo PRACE- Partnership for Advanced Computing in Europe, tier-0, presso CINECA, "*SMOLER Synaptic Mechanisms underlying Odor LEarning and Recognition*", Marzo 2016-Maggio 2017 responsabile Michele Migliore, peer reviewed

Progetto Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe B, presso il CINECA, "*PUFRNAMD*" Dicembre 2016-Dicembre 2017, responsabile Luca Maragliano, peer reviewed

Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe C, presso CINECA, "*HP10CFVHOK*" Marzo 2016-Gennaio 2017, responsabile Letizia Chiodo

Progetto Progetto di Supercalcolo ISCRA-classe B, presso il CINECA, "*PARAMD*" Febbraio 2018-Febbraio 2019, responsabile Luca Maragliano, peer reviewed

Accesso continuativo alla quota ore nodo riservata a University College of Dublin presso centro di calcolo ICHEC, [www.ichec.ie](http://www.ichec.ie), *Condominium Access*, dal Gennaio 2010 ad oggi.

## **Collaborazioni Scientifiche**

-Dal 1998 al 2015, col Prof. Giovanni Ciccotti, Dipartimento di Fisica, Università di Roma La Sapienza;

-Dal 2009 al 2013, col Prof. Giovanni Ciccotti, presso "*Advanced Molecular Simulation Research Laboratory*", University College of Dublin;

-Dal 2000- Dr. Luca Maragliano, Istituto Italiano di Tecnologia, Genova, su proteine da organismi termofili con metodi standard in MD; migrazione di leganti in eme-proteine; canali ionici ligand gated, con metodi non-standard di campionamento in MD e calcoli di energia libera;

-Dal 2010- Dr. Thérèse Malliavin, Unité de Bioinformatique Structurale, Institut Pasteur, Paris, su moti di larga scala in canali ionici ligand-gated complessati con agonisti e antagonisti e in proteina acetylcholine binding, con metodi non standard di campionamento in MD e calcoli di

energia libera;

-Dal 2018- Dr. Thérèse Malliavin, Unité de Bioinformatique Structurale, Institut Pasteur, Paris, su struttura-dinamica-funzione della proteina del botulino.

Dal 2013- Dr. Letizia Chiodo, Università Campus Biomedico, Roma, su canali ionici ligand-gated complessati con agonisti e antagonisti, con metodi standard e non standard di campionamento in MD e calcoli di energia libera; interazione proteine virali con RNA non coding coi metodi di bioinformatica;

-Dal 2015- Dr. Francesca Guerrieri, Prof. Massimo Levrero, Center for Life NanoScience@Sapienza, IIT-Roma, Dipartimento di Medicina Interna-DMISM, Università di Roma La Sapienza, INSERM U1052, Cancer Research Center of Lyon (CRCL), Lione, su interazione proteine virali con RNA non coding;

-Dal 2008 al 2011- Prof. Eric Vanden-Eijnden, Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, sulla migrazione di leganti in eme-proteine con metodi non standard di campionamento in MD e calcoli di energia libera;

-Dal 2010 al 2013- Prof. Ron Elber, University of Texas at Austin, su cinetiche di ricombinazione del legante e meccanismi di transizione allosterica in eme-proteine sotto fotoilluminazione continua, con schemi computazionali semi classici nell'ambito della Non Equilibrium Molecular Dynamics;

-Dal 2011 al 2013, Dr. Gianluca Lattanzi, Dipartimento di Fisica, Università di Trento, su proprietà elettriche di soluzioni ioniche e doppi strati lipidici, con metodi di Non Equilibrium Molecular Dynamics;

-Dal 2012 al 2014 Dr. Adolfo Poma, Dr. Antonio Deiana, post doc fellow presso il Dipartimento di Fisica Università di Roma La Sapienza, su studio di metastabilità di determinazioni NMR di domini di proteine di membrana e predizione di strutture, con simulazioni MD, metodi non standard di campionamento in MD, e calcoli di energia libera.

### **Attività di ricerca all'estero:**

Settembre 2009-Settembre 2013: Membro del laboratorio "*Advanced Molecular Simulations*" dello University College Dublin.

Il Laboratorio è stato finanziato da un progetto della Science Foundation Ireland, SFI-PI Grant #08 IN.1-11869, che ha coinvolto i gruppi del Prof. Eckhard Spohr (University of Duisburg-Essen, GE), Eric Vande-Eijnden (Courant Institute, N.Y., U.S.A.), Baron Peters (University of California Santa Barbara, CA., U.S.A.), Ron Elber (University of Texas, U.S.A.), Niall English (UCD, Dublin, IE).

Dal Gennaio 2014: Visitor at CECAM.IRL, Nodo Irlandese del CECAM

<https://www.cecarn.org/visitors.html>

13-27 Aprile 2013: University of Texas at Austin, ICES Center for Computational Life Sciences and Biology, presso il gruppo del Prof. Ron Elber

12-24 Marzo 2012: University of Texas at Austin, ICES Center for Computational Life Sciences and Biology, presso il gruppo del Prof. Ron Elber

12-26 Gennaio 2011: University of Texas at Austin, ICES Center for Computational Life Sciences and Biology, presso il gruppo del Prof. Ron Elber

6-11 Settembre 2010: University of Texas at Austin, ICES Center for Computational Life Sciences and Biology, presso il gruppo del Prof. Ron Elber

16-23 Novembre 2009: Courant Institute of Mathematical Sciences, NYU, presso il gruppo del Prof. Eric Vanden-Eijnden.

17-23 Maggio 2009: IMA-Institute for Mathematics and its applications, Minneapolis, Minnesota, nell'ambito del Programma "Mathematics and Chemistry";

18-29 Febbraio 2008: Esi-Erwin Schroedinger International Institute for Mathematical Physics, Vienna, nell'ambito del Programma "Metastability and rare events in complex systems".

## **Pubblicazioni su riviste internazionali**

F.Brugè, **G.Cottone**, S.L.Fornili: *Solute-solute solvent induced interaction: Molecular Dynamics simulation of a mixed model system in water*, Chem. Phys. Letters, 235, 402-409, 1995

F.Brugè, **G.Cottone**, R.Noto, S.L.Fornili: *Microscopic aspects of solute-solute interactions induced by the solvent*, J. Chim.Phys., **93**, 1858-1878, 1996

**G.Cottone**, R.Noto, S.L.Fornili: *Water interaction with the phenylenediamine isomers: ab initio potential evaluation and Molecular Dynamics simulation*, J.Chem.Soc., Faraday Transactions, 94, 2337-2342, 1998

**G.Cottone**, R.Noto, G. La Manna, S.L.Fornili: *Ab initio study on the photoisomers of a nitro-substituted spiropryan*, Chem.Phys.Letters, 319, 51-59, 2000

**G.Cottone**, L.Cordone, G.Ciccotti: *Molecular Dynamics simulation of carboxy-myoglobin embedded in a trehalose-water matrix*, Biophys. J., 80, 931-938, 2001

**G. Cottone**, G. Ciccotti, L. Cordone: *Protein-trehalose-water structures in trehalose coated carboxy-myoglobin*, J. Chem. Phys., 117, 9862-9866, 2002. Il lavoro è stato selezionato per il numero del 15 Novembre 2002, vol. 4, del [Virtual Journal of Biological Physics Research](http://www.vjbio.org), [www.vjbio.org](http://www.vjbio.org)

S. Giuffrida, **G. Cottone**, F. Librizzi e L. Cordone, *Coupling between the thermal evolution of heme pocket and external matrix structure in trehalose coated carboxy-myoglobin*, J. Phys. Chem B, 107, 13211-13217, 2003

L. Maragliano, **G. Cottone**, L. Cordone, G. Ciccotti *Atomic mean square displacements in proteins by Molecular Dynamics: a case for analysis of variance*, Biophys. J., 86, 2765-2772, 2004

**G. Cottone**, R. Noto, G. La Manna *Theoretical study of spiropryan-merocyanine thermal isomerization*, Chem. Phys. Letter, 388, 218-222, 2004

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, *Structure-dynamics coupling between protein and external matrix in sucrose coated and in trehalose coated MbCO: a FTIR study*, J. Phys. Chem B, 108, 15415-15421, 2004

**G. Cottone**, S. Giuffrida, G. Ciccotti, L. Cordone *Molecular Dynamics simulation of sucrose coated and trehalose coated carboxy-myoglobin*, Proteins, 59, 291-302, 2005

L. Cordone, **G. Cottone**, S. Giuffrida, G. Palazzo, G. Venturoli, C. Viappiani, *Internal Dynamics and Protein-Matrix Coupling in Trehalose Coated Proteins*, Biochimica et Biophysica Acta Proteins and Proteomics 1749, 252-281, 2005

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, *Role of Solvent on Protein-Matrix Coupling in MbCO Embedded in Water-Saccharide Systems: an FTIR study*. Biophys. J., 91, 968-980, 2006

**G. Cottone\***, *A comparative study of carboxy myoglobin in saccharide/water systems by Molecular Dynamics Simulation* J. Phys. Chem B, 111, 3569, 2007, \*corresponding author

L. Cordone, **G. Cottone**, S. Giuffrida *Role of residual water hydrogen bonding in sugar/water/biomolecule systems: a possible explanation for trehalose peculiarity* J. Phys.: Condens. Matter, 19, 205110, 2007

L. D'Alfonso, M. Collini, F. Cannone, G.Chirico, B. Campanini, **G. Cottone**, L. Cordone, *Single Molecule Study of GFP-mut2 Proteins Caged in Trehalose-Water Matrixes: Spatially Inhomogeneous Protein-Water-Sugar Structures*, Biophys. J., 93, 284-293, 2007

L. Cordone, **G. Cottone**, S. Giuffrida, F. Librizzi, *Thermal evolution of the CO stretching band in carboxy-myoglobin in the light of neutron scattering and molecular dynamics simulations*, Chem. Phys, 345, 275-281, 2008

**G. Cottone**, R. Noto, G.La Manna, *Density Functional Theory study of the TTC> TTT Isomerization of a Photochromic Spiropiran Merocyanine*, Molecules, 13, 1246-1252, 2008

G. Bellavia, **G. Cottone**, S. Giuffrida, A. Cupane, L. Cordone, *Thermal Denaturation of Myoglobin in Water-Disaccharide Matrixes: Relation with the Glass Transition of the System*, J Phys Chem

B, 113, 11543-11549, 2009

L. Maragliano, **G. Cottone**, E. Vanden-Ejinden, G. Ciccotti, *Mapping the network of pathways of CO diffusion in myoglobin*, J. Am. Chem. Soc., 132, 1010-1017, 2010

A. Longo, S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, *Myoglobin embedded in saccharide amorphous matrices: water-dependent domains evidenced by Small Angle X-Ray Scattering*, Phys Chem Chem Phys, 12, 6852-6858, 2010

S. Giuffrida, **G. Cottone**, E. Vitrano, L. Cordone, *A FTIR study on low hydration saccharide amorphous matrices: thermal behaviour of the water association band*, J. Non-Cryst. Solids, 357, 677-682, 2011

G. Bellavia, S. Giuffrida, **G. Cottone**, A. Cupane, L. Cordone, *Protein thermal denaturation and matrix glass transition in different protein-trehalose-water systems*, J. Phys. Chem. B, 115, 6340-6346, 2011

**G. Cottone\***, G. Lattanzi, G. Ciccotti, R. Elber, *Multiphoton Absorption of Myoglobin–Nitric Oxide Complex: Relaxation by D-NEMD of a Stationary State*, J. Phys. Chem. B, 116, 3397-3410, 2012, \*corresponding author

S. Giuffrida, **G. Cottone**, G. Bellavia, L. Cordone, *Proteins in amorphous saccharide matrices: Structural and dynamical insights on bioprotection*, Eur. Phys. J. E, 36, 79, 2013

Z. HosseiniNaveh, T. Malliavin, L. Maragliano, **G. Cottone\***, G. Ciccotti, *Conformational changes in acetylcholine binding protein investigated by Temperature Accelerated Molecular Dynamics*, Plos One, 9, e88555, 2014, \*corresponding author

L. Cordone, **G. Cottone**, A. Cupane, A. Emanuele, S. Giuffrida, M. Levantino, *Immobilization of proteins in polysaccharide matrices: biochemical and biophysical properties*, Current Organic Chemistry, 19, 1684-1706, 2015

L. Chiodo, T.E. Malliavin, L. Maragliano, **G. Cottone\***, G. Ciccotti, *A structural model of the human alpha7 nicotinic receptor in an open conformation*, Plos One, 10, e0133011, 2015, \*corresponding author

M. Levantino, G. Schirò, H.T. Lemke, **G. Cottone**, J.M. Glowia, D. Zhu, M. Chollet, H. Ihee, A. Cupane, M. Cammarata, *Ultrafast myoglobin structural dynamics observed with an X-ray free electron laser*, Nature Communications, 6, 6772, 2015

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, *Water association band as a marker for hydrogen bond in trehalose amorphous matrix*, Phys Chem Chem Phys, 19, 4251-4265, 2017

L. Chiodo, T.E. Malliavin, L. Maragliano, **G. Cottone**, *A possible desensitized state conformation of the human alpha7 nicotinic receptor: a molecular dynamics study*, Biophysical Chemistry, 229, 99-109, 2017

E. Semeraro, S. Giuffrida, **G. Cottone**, A. Cupane, *Biopreservation of Myoglobin in Macromolecular Crowded Environment: a Comparison between Gelatin and Trehalose Matrices*, J. Phys. Chem. B, 121, 8731-8741, 2017

F. Guerrieri, D. Salerno, L. Chiodo, **G. Cottone**, M. Pallocca, O. Floriot, M. Levrero, *HBx/DLEU2/EZH2 co-regulation of host genes expression in HCC*, Journal of Hepatology, 68, S687-S688, 2018, DOI: [https://doi.org/10.1016/S0168-8278\(18\)31634-9](https://doi.org/10.1016/S0168-8278(18)31634-9), 2018

S. Giuffrida, L. Cordone, **G. Cottone**, *Bioprotection Can Be Tuned with Proper Protein/Saccharide Ratio: The Case of Solid Amorphous Matrices*, J. Phys. Chem. B, 10.1021/acs.jpcc.8b05098, 2018

L. Chiodo, T.E. Malliavin, S. Giuffrida, L. Maragliano, **G. Cottone\***, *Closed-Locked and Apo-Resting State Structures of the Human 7 Nicotinic Receptor: A Computational Study*, Journal of Chemical Information and Modeling, 10.1021/acs.jcim.8b00412, 2018, \*corresponding author

## **Pubblicazioni su volumi**

**G. Cottone**, L. Cordone, G. Ciccotti: “*Molecular Dynamics simulation of myoglobin in a trehalose-water system*” in Science and Supercomputing at Cineca: 2001 Report, pp. 517-521, ISBN: 8886037074, 2001

L. Maragliano, G. Ciccotti, **G. Cottone**, L. Cordone: “*Molecular Dynamics simulation of  $\beta$ -glycosidase from *Sulfolobus Solfataricus**” in Science and Supercomputing at Cineca: 2001 Report, pp. 131-137, ISBN: 8886037074, 2001

S. Giuffrida, **G. Cottone**, F. Librizzi, L. Cordone, “*Thermal evolution of heme pocket structure in trehalose coated carboxy-myoglobin probed by FTIR measurements*”, in Progress in Condensed Matter Physics: Festschrift in honour of Vincenzo Grasso, edito da G. Mondio e L. Sipigni, Messina, 2004, pp. 131-138, ISBN: 8874380100

**G. Cottone**, L. Cordone, S. Giuffrida, G. Ciccotti: “*Protein-solvent coupling in myoglobin/sugar/water systems: a Molecular Dynamics study*” in Science and Supercomputing at Cineca: 2005 Report, pp. 578-584, ISBN 9788886037167, 2005

S. Giuffrida, **G. Cottone**, A. Longo, L. Cordone, “*Proteins in amorphous saccharides: structural and dynamical insights on bioprotection*”, in “Dynamics of biological molecules by neutron scattering”, Editor S. Magazù, Bentham Science, Dubai, Uae, ISBN: 978-1-60805-334-6, 2011

L. Chiodo, T.E. Malliavin, L. Maragliano, **G. Cottone**, “*Large scale motions in models of human nicotinic receptors*”, Cineca HPC Report 2014, ISBN 978-88-86037-35-8, 2014

L. Chiodo, T.E. Malliavin, L. Maragliano, **G. Cottone**, G. Ciccotti, “*A full atomistic computational study of the inactive states of the human alpha7 nicotinic receptor*”, Cineca HPC Report 2017, ISBN 978-88-86037-38-9, 2017

**G. Cottone**, R. Noto, G. La Manna, S. L. Fornili: “*Photoisomers of a nitro-substituted spiropyran: ab initio study of structural and energetic properties*”, Note del Polo, Nota N.17, Editore: Polo di Crema, Università degli Studi di Milano, 2000

**G. Cottone** “*Large Scale Conformational Transitions In Ligand Gated Ion Channels.*” in: Irish Center of High-End Computing, ICHEC-National Service Review 2012-2013. p. 34-35, 2014

## **Contributi a congressi internazionali e nazionali**

**G. Cottone**, R. Noto, S. L. Fornili: “*Water interaction with the phenylenediamine isomers: ab initio potential evaluation and Molecular Dynamics simulation*”, NATO ASI School on “Hydration Processes in Biology: Theoretical and Experimental Approaches”, Les Houches, 4-15 Maggio 1998

**G. Cottone**, L. Cordone, G. Ciccotti: “*Molecular Dynamics simulation of carboxy-myoglobin embedded in a dry trehalose-water matrix*”, SIMU Conference “Bridging the Time Scale Gap”, Konstanz, 10-13 Settembre 2001

L. Maragliano, **G. Cottone**, L. Cordone, G. Ciccotti: “*Molecular Dynamics simulations of  $\beta$  Glycosidase enzyme*”, SIMU Conference “Bridging the Time-Scale Gap”, Konstanz, 10-13 Settembre 2001

**G. Cottone**, G. Ciccotti e L. Cordone: “*Protein trehalose water structures in trehalose coated carboxy-myoglobin*”, ESS Workshop “Flexibility and Function of proteins”, Heidelberg, 25-27 Gennaio 2002

L. Maragliano, **G. Cottone**, L. Cordone, G. Ciccotti: “*Molecular Dynamics simulations of  $\beta$  glycosidase from thermophilic *Sulfolobus Solfataricus* and a mesophilic homologue*”, ESS Workshop “Flexibility and Function of proteins”, Heidelberg, 25-27 Gennaio 2002

R. Noto, **G. Cottone**, G. La Manna: “*Theoretical calculation of the activation energy of a spiropyran-merocyanine isomerization*”, WATOC 2002, VI World Congress of Theoretically Oriented Chemistry, Lugano, Svizzera, 4-9 Agosto 2002

**G. Cottone**, R. Noto, G. La Manna: “*Theoretical calculation of the activation energy of a spiropyran-merocyanine isomerization*”, Mediterranean Seminar on Computational Chemistry for Complex Systems, Palermo 4-7 Ottobre 2002

**G. Cottone**, G. Ciccotti, L. Cordone: “*Protein trehalose water structures in trehalose coated carboxy-myoglobin*”, Mediterranean Seminar on Computational Chemistry for Complex Systems, Palermo 4-7 Ottobre 2002

**G. Cottone**, G. Ciccotti e L. Cordone: “*Protein trehalose water structures in trehalose or sucrose coated carboxy-myoglobin*”, 295 WE-Heraeus Seminar “Biological Physics of Proteins. Structure, Flexibility and Function”, Bad Honnef, Germania, 10-12 Febbraio 2003

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone: “*Thermal evolution of protein and matrix dynamics and structure in glassy and plasticized amorphous carboxy-myoglobin samples*”. 295 WE-Heraeus Seminar “Biological Physics of Proteins. Structure, Flexibility and Function”, Bad Honnef, Germania, 10-12 Febbraio 2003

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone. "Structure-Dynamics Coupling Between Protein And External Matrix In Mbco Embedded In Various Saccharide Matrices: A FTIR Study". ICBP 2004, 5<sup>th</sup> International Conference On Biological Physics. Gothenburg, Svezia, 23-27 Agosto 2004

**G. Cottone**, S. Giuffrida, G. Ciccotti, L. Cordone, "Molecular Dynamics Simulation Of Carboxy Myoglobin In Trehalose And Sucrose-Water Systems". Simu 2004-Bridging The Scale, Genova, Italy. 29-31 Agosto 2004.

**Cottone G**, S. Giuffrida, G. Ciccotti E L. Cordone, "Molecular Dynamics Simulation Of Carboxy Myoglobin In Trehalose And Sucrose-Water Systems", Conference On Computational Physics Ccp 2004. Genova, 1-4 Settembre 2004.

L. Maragliano, **G.Cottone**, L. Cordone, G. Ciccotti. "Atomic Mean Square Displacements In Proteins By Molecular Dynamics: A Case For Analysis Of Variance", Conference On Computational Physics Ccp 2004. Genova, 1-4 Settembre 2004.

S.Giuffrida, **G. Cottone**, L.Cordone: " Water association band as a marker of the matrix structure in amorphous saccharide and saccharide-protein samples", 5th International Discussion Meeting on relaxations in Complex Systems, Lille, 6-13 Luglio 2005

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone "The Role of Solvent on Protein-Matrix Coupling in MbCO Embedded in Water-Saccharide Systems", BIONEUTRON 2006, Taormina, 7-10 Ottobre 2006

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "Water association band: an useful tool for studying the water structure in samples of low water content", BIONEUTRON 2006, Taormina, 7-10 Ottobre 2006.

L. Cordone, **G. Cottone**, S. Giuffrida, "Interconversion among low tier substates in MbCO: an FTIR, Neutron Scattering and Molecular Dynamics simulation study", Protein at Works 2007, Perugia, 28-30 Maggio 2007

L. D'Alfonso, M. Collini, G. Chirico, B. Campanini, **G. Cottone**, L. Cordone, "GFP-mut2 proteins in trehalose-water matrixes: spatially heterogeneous protein-water-sugar structure", 6th European Biophysics Congress, Londra, 14-18 Luglio 2007

L. Maragliano, **G. Cottone**, L. Cordone, E. Vanden-Eijnden, G. Ciccotti, "Mapping the Free Energy landscape of CO diffusion in Myoglobin", EPS-CMD 22, Roma, 25-29 Agosto 2008

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "Protein-matrix Coupling in MbCO embedded in saccharide matrices", 3rd ERA-Chemistry Flash Conference, Killarney, Irlanda, 9-13 Marzo 2008

L. Maragliano, **G. Cottone**, E. Vanden-Eijnden, G. Ciccotti, "Mapping CO diffusion paths in Myoglobin with the Single Sweep Method", Institute for pure and applied mathematics, UCLA, 23 -27 Febbraio 2009

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "FTIR study on reciprocal protein↔matrix effects in dry amorphous saccharide systems", 6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Roma, 30 Agosto-5 Settembre 2009

G. Bellavia, **G. Cottone**, S. Giuffrida, L. Cordone, A. Cupane, "Relationship between the glass transition of myoglobin-water-disaccharide systems and protein thermal denaturation", 6<sup>th</sup> International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Roma, 30 Agosto- 5 Settembre 2009

A. Longo, S. Giuffrida, M. Panzica, **G. Cottone**, L. Cordone, "Saxs and ftir study on mbco saccharide amorphous systems", 6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Roma, 30 Agosto-5 Settembre 2009

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "Thermal behavior of dry and hydrated mbco crowded systems", 6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Roma 30 Agosto-5 Settembre 2009

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "MbCO↔matrix reciprocal effects in low hydration amorphous saccharide systems: a FTIR study", 13<sup>th</sup> ECSBM, Palermo, August 28 – September 2, 2009

A. Longo, S. Giuffrida, M. Panzica, **G. Cottone**, L. Cordone, "Saxs and ftir study on mbco saccharide amorphous systems", 13<sup>th</sup> ECSBM, Palermo, August 28 – September 2, 2009

G. Bellavia, **G. Cottone**, S. Giuffrida, A. Cupane, L. Cordone, "Thermal denaturation of myoglobin in water-sugar matrices and relationship with the glass transition of the system", 13<sup>th</sup> ECSBM, Palermo, August 28 – September 2, 2009

L. Maragliano, **G. Cottone**, G. Ciccotti, E. Vanden-Eijnden, "Mapping CO diffusion paths in Myoglobin with the Single Sweep Method", 54<sup>th</sup> Biophys. Soc Meeting, S. Francisco, 19-24 Febbraio 2010 **vedi in Biophys J., 98, 582, 2010**

S. Giuffrida, A. Longo, **G. Cottone**, L. Cordone, "FTIR and SAXS study on MbCO-Saccharide amorphous systems: protein-matrix reciprocal effects", Hercules XX Symposium, Grenoble Francia, 25-26 Marzo 2010

G. Bellavia, **G. Cottone**, S. Giuffrida, A. Cupane, L. Cordone, "Effects of the protein net charge and steric hindrance on the glass transition of protein-trehalose-water systems and on the protein thermal denaturation", *Frontiers in Water Biophysics*, Trieste, 23-26 Maggio 2010

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "Hydrogen bond properties of saccharide matrices studied through infrared water association band", *Frontiers in Water Biophysics*, Trieste, 23-26 Maggio 2010

G. Bellavia, **G. Cottone**, S. Giuffrida, A. Cupane, L. Cordone, "Matrix Glass Transition And Embedded Protein Denaturation: Effect of Trehalose on Different Proteins", 10th International Workshop on Non-Crystalline Solids (IWNCS10), Barcelona, Spagna, 21-23 Aprile 2010

S. Giuffrida, **G. Cottone**, A. Longo, L. Cordone, "MbCO in Saccharide Solid Amorphous Systems: A Combined FTIR and SAXS Study", 55-th Annual Meeting Biophysical Society, Baltimore, USA, 5-9 Marzo, 2011 vedi in **Biophys. J.** **100**, 357

G. Lattanzi, M.L. Mugnai, **G.Cottone**, G.Ciccotti, R. Elber, *The electric properties of ionic solutions: a molecular dynamics (preliminary) study*, 8<sup>th</sup> Liquid Matter Conference, Vienna, 6-10 Settembre 2011

G. Lattanzi, M.L. Mugnai, **G.Cottone**, G.Ciccotti, R. Elber, *The electric properties of ionic solutions: a molecular dynamics (preliminary) study*, Simbioma 2011-Conference on Molecular Simulations in Biosystems and Material Science, Konstanz, Germania, 28 Settembre-1 Ottobre 2011.

**G.Cottone**, G. Lattanzi, G. Ciccotti, R. Elber, "Computational Modeling of Geminate Recombination and Energy Relaxation of Nitric Oxide in Myoglobin under Constant Illumination", Simbioma 2011-Conference on Molecular Simulations in Biosystems and Material Science, Konstanz, Germania, 28 Settembre-1 Ottobre 2011.

Z.Hoseyni, **G.Cottone**, T. E. Malliavin, L. Maragliano, G. Ciccotti, "Exploring the dynamics of AChBP unbound and bound to the Lobeline partial agonist", 16th Irish Atomistic Simulators and Nanoscale Simulators Ireland Meeting Trinity College Dublin, 12 -13 Gennaio 2012

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "Cosolutes affect structure and dynamics of myoglobin trehalose amorphous systems: a FTIR and MD study", 7th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Barcelona, Spagna, 21-26 Luglio, 2013

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "Protein Bioprotection in disaccharides: a multiscale approach", 7th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Barcelona, Spagna, 21-26 Luglio, 2013

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "Water effects on saccharide matrices studied with molecular dynamics", American Chemical Society National Meeting, New Orleans, 7-11 Aprile 2013

Zeynab Mohammad Hosseini Naveh, Therese E. Malliavin, Luca Maragliano, **G.Cottone**, Giovanni Ciccotti, "Conformational Changes in Acetylcholine Binding Protein Investigated by Temperature Accelerated Molecular Dynamics", CECAM workshop on "Binding free energy and kinetics: computation meets experiments", IIT-Genova, 10-12 Giugno 2014

Letizia Chiodo, Therese E. Malliavin, Luca Maragliano, **G.Cottone**, Giovanni Ciccotti, "Molecular dynamics simulations of a new model of human  $\alpha 7$  nicotinic receptor", CECAM workshop on "Binding free energy and kinetics: computation meets experiments", IIT-Genova, 10 12 Giugno 2014

Letizia Chiodo, Therese E. Malliavin, Luca Maragliano, **G.Cottone**, "Molecular dynamics simulations of a new model of human  $\alpha 7$  nicotinic receptor". CECAM Workshop on "Molecular and coarse-grained modelling of interactions at bio-nano interface, Dublino, Irlanda, 22-24 Settembre 2014

E.F.Semeraro, S. Giuffrida, **G.Cottone**, A. Cupane, "Trehalose vs gelatin: a comparison between crowding effects", *Frontiers in Water Biophysics*, Erice, 7-3 Settembre 2015.

L.Cordone, **G.Cottone**, A. Cupane, A. Emanuele, S. Giuffrida, M. Levantino, "Proteins in trehalose: a consistent picture from a multitechnique approach", *Frontiers in Water Biophysics*, Erice, 7-3 Settembre 2015.

Letizia Chiodo, Therese E. Malliavin, Luca Maragliano, **G.Cottone**, "Role of water in the open and closed-locked structures of the human  $\alpha 7$  nicotinic receptor: a full atomistic computational study of native and mutated forms", *Frontiers in Water Biophysics* 2017, EMFCSC, XI Course International School of Statistical Physics, Erice, 23-27 Maggio 2017

S. Giuffrida, **G.Cottone**, A. Cupane, L. Cordone, "Bioprotection by saccharides and the trehalose peculiarity: a multitechnique approach", International School on Water and Water systems: the hydrophobic effect, Erice, Luglio 4-11 2018.

F. Brugè, **G. Cottone**, S. L. Fornili: "*Solute-solute solvent induced forces: a MD simulation of an immobilized hydrophilic-hydrophobic pair in water*", XII Congresso Nazionale della Società Italiana di Biofisica Pura e Applicata, Palermo, 23-28 Settembre 1994

**G. Cottone**, R. Noto, S. L. Fornili: "*Water interaction with meta-phenylenediamine: ab initio potential evaluation and Molecular Dynamics simulation*", Abstracts del Congresso Nazionale di Fisica della Materia, Chia Laguna, Cagliari, 19-23 Maggio 1997

**G. Cottone**, R. Noto, S. L. Fornili: "*Proprietà dell'idratazione degli isomeri della fenilendiammina: calcolo ab initio dei potenziali di interazione e simulazione di Dinamica Molecolare*", XIV Congresso Nazionale della Società Italiana di Biofisica Pura ed Applicata, Genova, 24-27 Settembre 1998

**G. Cottone**, R. Noto, G. La Manna, S. L. Fornili: "*Ab initio study on the photoisomers of a nitro substituted spiropyrans*", NFM Meeting, Catania, 14-18 Giugno 1999

**G. Cottone**, L. Cordone, G. Ciccotti: "*Molecular Dynamics simulation of myoglobin in concentrated trehalose solutions*", INFM Meeting, Catania, 14-18 Giugno 1999

**G. Cottone**, L. Cordone, G. Ciccotti: "*Molecular Dynamics simulation of carboxy-myoglobin in a trehalose-water matrix*", XV Congresso Nazionale della Società Italiana di Biofisica Pura ed Applicata, Parma, 23-25 Ottobre 2000

**G. Cottone**, G. Ciccotti, L. Cordone: "*Carboxymyoglobin-trehalose interaction: a Molecular Dynamics study*", INFM Meeting, Roma, 18-22 Giugno 2001

L. Maragliano, **G. Cottone**, L. Cordone, G. Ciccotti: "*Molecular Dynamics simulation of  $\beta$  glycosidase from *Sulfolobus Solfataricus**", INFM Meeting, Roma, 18-22 Giugno 2001

L. Maragliano, **G. Cottone**, L. Cordone, G. Ciccotti: "*Molecular Dynamics simulations of  $\beta$  glycosidase from thermophilic *Sulfolobus Solfataricus* and a mesophilic homologue*", Acta Biophysica Romana III Edizione, Università Cattolica del Sacro Cuore, Roma, 18-19 Aprile 2002

**G. Cottone**, S. Giuffrida, G. Ciccotti, L. Cordone: "*Protein-Saccharide-Water Structures in Trehalose or Sucrose-Coated MbCO: an Experimental and Simulative Study*", INFM Meeting, Genova, 23-25 Giugno 2003

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone: "*Thermal Evolution of Protein and Matrix Conformational Dynamics and Structure in Glassy and Plasticized Amorphous Carboxy-Myoglobin Samples*", INFM Meeting, Genova, 23-25 Giugno 2003

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone: "*Structure and Dynamics in Glassy and Plasticized Amorphous Disaccharide-Water Samples: A FTIR Study*", INFM Meeting, Genova, 8-10 Giugno 2004

**G. Cottone**, S. Giuffrida, L. Cordone "Protein-Solvent coupling in carboxymyoglobin/ sugar/water systems by Molecular Dynamic Simulation" INFM Meeting, Genova. 22-25 Giugno 2005

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone "Water Association Band as marker of the matrix structure in amorphous saccharide and saccharide-protein samples, "INFM Meeting, Genova. 22-25 Giugno 2005

**G. Cottone**, S. Giuffrida, L. Cordone "*Protein-solvent coupling in carboxy-myoglobin—sugar-water systems by Molecular Dynamics Simulation*", XVIII SIBPA, Palermo, 17-2 Settembre 2006

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "*Role Of Solvent On Protein-Matrix Coupling In Mbco Embedded In Water-Saccharide Systems: An FTIR Study*", XVIII SIBPA, Palermo, 17-2 Settembre 2006

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "*Water association band as a marker of the matrix structure in amorphous saccharide and saccharide-protein samples*", XVIII SIBPA, Palermo, 17-2 Settembre 2006

L. D'Alfonso, M. Collini, F. Cannone, G. Chirico, B. Campanini, **G. Cottone**, L. Cordone, "*Inhomogeneous Protein-Water-Sugar Structures of Single GFP-mut2 Proteins Caged in Trehalose-Water Matrixes*", XVIII SIBPA, Palermo, 17-2 Settembre 2006

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "*Water association band as a marker of the matrix structure in amorphous saccharide and saccharide-protein samples*", XCII SIF, Torino, 19-22 Settembre

2006

**G. Cottone**, L. Cordone, L. Maragliano, E. Vanden-Eijnden, G. Ciccotti, "Structure-Dynamics Function of Proteins: Molecular Dynamics Simulations of Myoglobin in Water And Complex Solvents", Grid Open Days 2007. Università Di Palermo, 6-7 Dicembre 2007.

**G. Cottone**, L. Maragliano, G. Ciccotti, E. Vanden-Eijnden, "Ricostruzione del panorama di energia libera per il processo di diffusione del CO all'interno della mioglobina", IES08, Napoli, 27-29 Maggio 08.

**G. Cottone**, S. Giuffrida, L. Cordone, "Atomistic MD simulation of proteins in complex solvents", Workshop finale dei Progetti Grid del PON "Ricerca" 2000-2006 - Avviso 1575, Catania, 10-12 Febbraio 2009

A. Cupane, G. Bellavia, S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "A calorimetric study of ternary protein-trehalose-water systems matrix glass transition and protein thermal denaturation", International Workshop on "Dynamic Crossover Phenomena in Water and other glass-forming liquids", Fiesole, 11-13 Novembre 2010

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "Water effects on saccharide matrices studied with Molecular Dynamics", FISMAT 2013, Milano, 9-13 Settembre 2013

Z. HosseiniNaveh, T. Malliavin, L. Maragliano, **G. Cottone**, G. Ciccotti, « Acceleration of the AchBP conformational transition using Temperature Accelerated Molecular Dynamics », FISMAT 2013, Milano, 9-13 Settembre 2013

G. Singh, S. Giuffrida, **G. Cottone**, A. Cupane, "Temperature, hydration and environment effects on myoglobin dynamics by MD simulation", XXII Congresso Nazionale SIBPA, Palermo, 21-24 Settembre 2014

S. Giuffrida, **G. Cottone**, L. Cordone, "An "optimal" protein-saccharide ratio for bioprotection is present in low hydration amorphous saccharide glassy systems: a FTIR study", FISMAT 2015, Palermo, 28 Settembre-2 Ottobre 2015

E.F. Semeraro, S. Giuffrida, **G. Cottone**, A. Cupane, "Specific and aspecific effects in bioprotection of Myoglobin: a comparison between glassy trehalose and gelatin crowding", FISMAT 2015, Palermo, 28 Settembre-2 Ottobre 2015

L. Cordone, **G. Cottone**, A. Cupane, A. Emanuele, S. Giuffrida, M. Levantino, "Proteins in saccharides matrices: biochemical and biophysical aspects", FISMAT 2015, Palermo, 28 Settembre-2 Ottobre 2015

Letizia Chiodo, Therese E. Malliavin, Luca Maragliano, **G. Cottone**, Giovanni Ciccotti, "A new structural model of the human  $\alpha 7$  nicotinic receptor in an open conformation", FISMAT 2015, Palermo, 28 Settembre-2 Ottobre 2015

Letizia Chiodo, Debora Salerno, **G. Cottone**, Safaa Jeddari, Giancarlo Ruocco, Massimo Levrero, Francesca Guerrieri, "Experiments and computational investigations on HBx /Dleu2 lncRNA complexes: a possible "address code" to TRIM13 target", FISMAT 2015, Palermo, 28 Settembre-2 Ottobre 2015

## Comunicazioni orali:

"Molecular Dynamics Simulation of Trehalose Coated Carboxy-Myoglobin", INFM Meeting, Genova, 12-16 Giugno 2000

"Molecular Dynamics simulation of carboxy-myoglobin embedded in a trehalose-water matrix", CECAM Workshop on: Challenges in Free energy calculations, Lione, 19-21 Giugno 2000

"Protein-solvent coupling in carboxy-myoglobin/sugar/water systems by molecular dynamics simulations", 5th International Discussion Meeting on relaxations in Complex Systems, Lille, 6-13 Luglio 2005, **relazione su invito**.

"Protein-solvent coupling in carboxy-myoglobin-sugar-water systems: Molecular Dynamics Simulations and Experiments", XCII SIF, Torino, 19-22 Settembre 2006, **relazione su invito**.

"Molecular dynamics simulations complement experimental data on protein embedded in sugar water systems", BIONEUTRON 2006, Taormina, 7-10 Ottobre 2006, **relazione su invito**.

"Pathways for Uptake and Expulsion of CO in Myoglobin", UCD NANOVATION Launch Event, 14 Ottobre 2009, Dublino

"Equilibrium and non equilibrium Molecular Dynamics simulations of biomolecules in solution and glassy matrices", Meeting congiunto CNISM-INSTM, Modeling molecolare e dei materiali, Firenze, 13 Maggio 2011

"Myoglobin: an ideal test case for new simulation methods and discovering new physics", Institute Pasteur, Unité de Bioinformatique Structurale, Parigi, 9 Maggio 2012, **relazione su invito**.

"Proteins in amorphous disaccharides: insights on bioprotection from Molecular Dynamics simulations and FTIR experiments", 7th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Barcelona, 21-26 July, 2013, **relazione su invito**.

"Multiphoton Absorption of Myoglobin-Nitric Oxide Complex: Relaxation by D-NEMD of a Stationary State", FISMAT 2013, Milano, 9-13 Settembre 2013

"Proteins in saccharide matrices: the trehalose peculiarity and the role of water", WATER AND WATER SYSTEMS 3rd Course of the ERICE School "NEUTRON SCIENCE AND INSTRUMENTATION", Erice, 22-31 Luglio 2016

"Proteins in saccharide matrices and the trehalose peculiarity: biochemical and biophysical aspects", CECAM Workshop on "Controlling food protein folding and aggregation: challenges and perspectives in industry, experiments and simulation", Dublino 18-20 Agosto 2016, **relazione su invito**.

"Thermodynamics and kinetics of ion translocation in the human alpha7 nicotinic receptor", CECAM Workshop on: Multiscale modelling in electrophysiology: from atoms to organs, USI-Lugano, 26-28 marzo 2018

### **Attività di revisore per:**

Scientific Reports

Journal of Physical Chemistry

Journal of Physical Chemistry Letters

Phys Chem Chem Phys

ACS Chemical Neuroscience

Plos One

Chem Phys Letters

BBA - Bioenergetics

Journal of Molecular Graphics and Modelling

Process Biochemistry

Journal of Food Engineering

British Journal of Pharmacology

**Palermo,  
14 Novembre 2018**

**Firma**

