

**CURRICULUM
VITAE
ALESSANDRO
PACIARONI**



INFORMAZIONI PERSONALI

Indirizzo Corso Umberto I, 13 05021 Acquasparta (TR) Italia
Telefono +39 3483340319
E-mail alessandro.paciaroni@unipg.it
Nazionalità Italiana
ORCID Id 0000-0002-3952-1634

ESPERIENZA PROFESSIONALE

- Tipo di impiego **Professore Associato SSD FIS/03**
• Nome e indirizzo del datore di lavoro Università degli Studi di Perugia, Dipartimento di Fisica e Geologia, Via Pascoli snc, 06123 Perugia (IT)
• Data (da – a) 01/03/2015-
- Tipo di impiego **Ricercatore SSD FIS/03**
• Nome e indirizzo del datore di lavoro Università degli Studi di Perugia, Dipartimento di Fisica, Via Pascoli snc, 06123 Perugia (IT)
• Data (da – a) 01/09/2001-28/02/2015
- Tipo di impiego **Ricercatore**
• Nome e indirizzo del datore di lavoro Istituto Nazionale per la Fisica della Materia (INFN, ora CNR), presso l'Institut Laue-Langevin (Grenoble, Francia)
• Data (da – a) 01/10/1998-31/08/2001
- Tipo di impiego **Ricercatore Post-Doc**
• Nome e indirizzo del datore di lavoro Istituto Nazionale per la Fisica della Materia (INFN, ora CNR), presso Università degli Studi di Perugia, Dipartimento di Fisica, Via Pascoli snc, 06123 Perugia (IT)
• Data (da – a) 01/02/1997-30/09/1998

ABILITAZIONE SCIENTIFICA NAZIONALE PRIMA FASCIA

- Sett. Conc.
- Data (da – a)

- Sett. Conc.
- Data (da – a)

- Sett. Conc.
- Data (da – a)

02/B1 (Fisica Sperimentale della Materia)

26/07/2018 - 26/07/2027

02/D1 (Fisica Applicata, Didattica e Storia della Fisica)

10/04/2018 - 10/04/2027

03/A2 (Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche)

31/07/2018 - 31/07/2027

RICERCA

ATTIVITÀ DI RICERCA

Principale ambito di Ricerca

Fisica dei sistemi biologici per applicazioni terapeutiche

Responsabile del “Laboratorio di Fisica del DNA e delle Biomolecole”, presso il Dipartimento di Fisica e Geologia, Università degli Studi di Perugia

Linee di ricerca

Sviluppo di strumentazione per scattering di neutroni presso Large-Scale facilities internazionali.

Dinamica, struttura e funzionalità in proteine di interesse terapeutico. Sistema più recentemente studiato: Proteasi Principale del SARS-CoV-2 e interazione con potenziali anti-virali a largo spettro.

Dinamica e stabilità di proteine in matrici amorfe biocompatibili per applicazioni farmaceutiche.

Dinamica dell'acqua di idratazione di proteine e DNA e relazione con la funzionalità biologica.

Stabilità conformazionale di G-quadruplex di DNA e interazioni con potenziali farmaci antitumorali.

Dinamica del proteoma batterico e stabilità cellulare.

ERC area

PE3 “Condensed Matter Physics -Structure, electronic properties, fluids, nanosciences, biological physics” e sector PE3_16 “Physics of Biological Systems”.

Keywords CUN

Biofisica; Analisi, modelli e simulazioni dei Sistemi Biologici; Diffrazione; Tecniche Spettroscopiche e Spettrometriche.

PROGETTI DI RICERCA FINANZIATI

- Progetto
 - Ente Finanziatore
 - Finanziamento
 - Ruolo
 - Data (da – a)
- Qbiodev** (Quantum biology for the development of photosynthetic devices)
MUR, dotazione del PON “Ricerca e Innovazione” 2014-2020, azione IV.6 “Contratti di ricerca su tematiche Green”
114 kEuro (Finanziamento MUR per Posizione ricercatore RTDa, cofinanziato per un anno)
Proponente Principale
01/01/2022-31/12/2024
- Progetto
 - Ente Finanziatore
 - Finanziamento
 - Ruolo
 - Data (da – a)
- PROTECT** (Selezione di inibitori della PROTEasi principale di SARS-CoV-2 per farmaci antivirali ConTro il COVID-19)
Fondazione Cassa di Risparmio di Perugia, Bando Settore Ricerca Scientifica e Tecnologica 2020
50 kEuro
Proponente Principale
03/2021-02/2023
- Progetto
 - Ente Finanziatore
 - Finanziamento
 - Ruolo
 - Data (da – a)
- PROTHER** (PROteome dynamics as a proxy for cellular THERmal stability)
Università Franco-Italiana, Bando VINCI 2018
60 kEuro (Finanziamento per una borsa di dottorato)
Proponente Principale
2018-2021
- Progetto
 - Ente Finanziatore
 - Finanziamento
 - Ruolo
 - Data (da – a)
- CONcePT** (CellulOse Nanofiber hydrogels for Protein Therapeutics).
Università degli Studi di Perugia, Fondo Ricerca di Base 2018
12 kEuro
Proponente Principale
2019-2020
- Progetto
 - Ente Finanziatore
 - Finanziamento
- VARI** (Dal 1997 al 2022 ho sottoposto come **Principal Investigator 54 proposte di esperimento con esito positivo** presso Large Scale Facilities nazionali (Elettra Sincrotrone Trieste) e internazionali (Institut Laue-Langevin - ILL, Grenoble; Maier-Leibnitz Zentrum - MLZ, Monaco; ISIS, Didcot; European Synchrotron Radiation Facility - ESRF, Grenoble; Diamond, Didcot). Il grant assegnato al PI per condurre le 53 proposte di esperimento (che include la partecipazione all'esperimento di due persone, costo medio stimato di circa di € 1000 per persona) corrisponde a un totale di circa € 108000. Questa stima non include il valore del beamtime necessario per l'esperimento, che risulta essere di alcune migliaia di euro/day, dipendendo dalla facility. Se si tenesse conto di tale valore, stimando una durata media per esperimento di 4 giorni e di € 5000 per giorno (ambidue le stime sono conservative), l'ammontare del finanziamento sarebbe superiore a 1 Meuro. Large-Scale Facilities nazionali e internazionali (su fondi MUR-CNR)
108 kEuro

- Ruolo
- Data (da – a)
- Progetto
- Ente Finanziatore
 - Finanziamento
 - Ruolo
 - Data (da – a)
- Progetto
- Ente Finanziatore
 - Finanziamento
 - Ruolo
 - Data (da – a)
- Progetto
- Ente Finanziatore
 - Finanziamento
 - Ruolo
 - Data (da – a)
- Progetto
- Ente Finanziatore
 - Finanziamento
 - Ruolo
 - Data (da – a)
- Progetto
- Ente Finanziatore
 - Finanziamento
 - Ruolo
 - Data (da – a)
- Progetto
- Ente Finanziatore
 - Finanziamento
 - Ruolo
 - Data (da – a)

PROGETTI DI RICERCA IN FASE DI VALUTAZIONE

- Progetto
- Ente Finanziatore
 - Finanziamento

Proponente Principale

1997-2022

T-Rex@ESS, Construction of the T-RexTime-of-Flight neutron spectrometer at the European Spallation Source.

MUR, tramite CNR.

4 MEuro

Co-proponente

2016-2025

VITALITY, Ecosistema dell'Innovazione.

MUR (Fondi PNRR).

25-30 MEuro

Co-proponente

01/07/2022-30/06/2025

NMI3 (Neutron and Muon Integrated Infrastructure Initiative)

European Commission FPVI, FP VII

300 kEuro

Co-proponente

2008-2016

PIK-ESS, Progettazione e Sviluppo di un prototipo di monocromatore ruotante per spettrometro time-focusing a ESS.

ELETTRA Sincrotrone Trieste, Bando PIK

214 kEuro

Co-proponente

2012-2014

"Cristalli liquidi di nDNA: modellizzazione di strutture G-quadruplex nella sequenza telomerica e dei meccanismi di stabilizzazione con scopo terapeutico."

CNR-Istituto Officina dei Materiali, Bando STARTUP PROT.N.0002054

25 kEuro

Proponente Principale

2011

Dynamics and relaxation in disordered and confined systems in the frequency domain from GHz to THz

MUR, PRIN2007

314 kEuro

Co-proponente

2007-2008

TAMeQUAD (Taming structure, conformation and stability of multimeric G-quadruplex DNA)

MUR (PRIN 2022)

188 kEuro

- Ruolo
- Data (da – a)

**ESPERIMENTI CONDOTTI
PRESSO LARGE SCALE
FACILITIES CON IL RUOLO DI PI
2018-2022**

- Centro di Ricerca
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo

Responsabile Locale Unità di Perugia
Sottomesso Marzo 2022 (IN VALUTAZIONE)

Dal 1997 al 2022 ho sottoposto come **Principal Investigator 54 proposte di esperimento con esito positivo** e partecipato come co-proponente ad altre **67 proposte di esperimento con esito positivo** presso Large Scale Facilities nazionali (Elettra Sincrotrone Trieste) e internazionali (Institut Laue-Langevin - ILL, Grenoble; Maier-Leibnitz Zentrum - MLZ, Monaco; ISIS, Didcot; European Synchrotron Radiation Facility - ESRF, Grenoble; Diamond, Didcot). **Per brevità segue l'elenco delle sole proposte dell'ultimo triennio con relativi esperimenti condotti come PI.**

Institut Laue-Langevin (Grenoble, France)

- 2021-04 8-04-922 Global proteome dynamics as a proxy for cellular thermal stability
- 2021-04 CRG-2877 Influence of anticancer drugs on the sub-nanosecond dynamics of G-quadruplex DNA
- 2020-04 DIR-216 Role of protein and water dynamics in the design of drugs against COVID-19. Complexation of main protease Mpro from SARS-CoV-2 with newly synthesized inhibitors
- 2020-04 8-04-885 Proteome dynamics as a proxy for cellular thermal stability
- 2019-04 8-03-980 Photoinduced structural changes in DNA G-quadruplex-porphyrin complexes
- 2019-04 8-03-983 Proteome structural changes along the path toward bacterial death. A small angle neutron scattering study.
- 2019-10 8-04-879 Global proteome dynamics as a proxy for cellular thermal stability.
- 2019-10 8-04-880 Nanosecond dynamics of G-quadruplex DNA in the presence of anticancer drugs.
- 2019-04 CRG-2605 Fast dynamics on an aggregation-prone protein-resveratrol complexes
- 2019-04 CRG-2663 Effects of biologically relevant cosolvents on the fast dynamics of PNIPAM-based systems
- 2019-04 CRG-2664 Proteome dynamics as a proxy for cellular thermal stability. Aquifex Aelicus Hyper-thermophile bacteria
- 2019-04 DL-04-44 Multi-technique investigation of the vibrational motions at the basis of the biological functionality of maltose binding protein
- 2018-04 8-04-839 Proteome dynamics as a proxy for cellular thermal stability
- 2018-10 9-10-1570 Tuning the fast dynamics of PNIPAM microgels through the use of biologically relevant co-solvents

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

• Centro di Ricerca

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

• Centro di Ricerca

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

• Centro di Ricerca

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

• Centro di Ricerca

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

• Data, numero di proposal, Titolo

2018-04 CRG-2536 Critical mean square displacements of biomolecules and loss of secondary structure. The case of natively disordered proteins
2018-04 CRG-2537 Proteome dynamics as a proxy for cellular thermal stability. Thermophile vs Hyper-thermophile bacteria.

Diamond (Didcot, UK)

2022- SM32199 "Molecular interaction between SARS-CoV-2 main protease and innovative small molecule inhibitors. "

2022- SM32331 "Molecular interaction between SARS-CoV-2 main protease and two small antivirals"

2020-SM27078 SAXS studies of the SARS-CoV-2 main protease Mpro: how the monomer-dimer equilibrium is affected by potential inhibitors

Maier-Leibnitz Zentrum (Monaco)

2020-P00778-01 Assessment of vibrational free-energy change of SARS-CoV-2 main protease Mpro upon complexation of newly synthesized inhibitors

2020-P00693-01 Proteome structural changes along the path toward bacterial death. A small angle neutron scattering study.

2020-P00697-01 Global proteome dynamics as a proxy for cellular thermal stability

2020-P00794-02 SANS investigations of the monomer-dimer mechanism of the SARS-CoV-2 main protease Mpro upon complexation with newly synthesized inhibitors

2018-14068 Nanosecond dynamics of G-quadruplex hydration water

2018-13904 Common dynamical regime of proteins at thermal unfolding and the coupling with the solvent in the high temperature regime

ISIS (Didcot, UK)

2020-RB2010531 Discriminating the conformation of G4 DNA by SANS.

2019-RB1920368 Human telomeric G-quadruplex complexed with the highly selective anticancer drug BRACO-19. A SANS investigation along the melting path

ELETTRA Sincrotrone (Trieste)

2020-20200480 Complexation of model B-DNA with chloroquine antiviral drug. A UVRR scattering study

2020-20200281 Intermediate states in the thermal unfolding of the human telomeric quadruplex complexed with the highly selective BRACO-19 drug. A UV resonant Raman study. PARTII.

2019-20195456 Human insulin loaded in TEMPO oxidized cellulose nanofiber hydrogels: a structural investigation.

2019-20192156 Structural characterization of human insulin-loaded cellulose nanofiber-based hydrogels

2019-20190362 Intermediate states in the thermal unfolding of the human telomeric quadruplex complexed with the highly selective anticancer BRACO-19 drug. An UV resonant Raman study

2019-20190305 Structural investigation on human insulin loaded in cellulose nano-fiber hydrogels

- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo
- Data, numero di proposal, Titolo

- Centro di Ricerca

- Data, numero di proposal, Titolo

2018-20187102 Onset of anharmonic motions and changes in secondary structures in dry and hydrated polypeptide powders revealed by vibrational dynamics

2018-20187059 Structural properties of proteins loaded in cellulose nano-fiber hydrogels

2018-20185234 Structural properties of proteins loaded in cellulose nano-fiber hydrogels

2018-20180249 Molecular mechanism of destabilization effect of glucose on native DNA as probed by UV resonant Raman scattering

European Synchrotron Radiation Facility (Grenoble)

03-2021 LS-3007 ID28 On the biological relevance of protein coherent collective dynamics

ATTIVITÀ GESTIONALE ISTITUTI DI RICERCA INTERNAZIONALI

COORDINAMENTO SCIENTIFICO ISTITUTI DI RICERCA INTERNAZIONALI

- Ente o Istituto
- Ruolo

- Data (anno accademico)

- Ente o Istituto
- Ruolo

- Data (anno accademico)

Institut Laue-Langevin (ILL, Grenoble, Francia)

Membro del **Consiglio Scientifico** (ILL è la sorgente “continua” per lo scattering di neutroni più potente e prestigiosa al mondo. Il Consiglio Scientifico è composto da circa 20 scienziati internazionali di chiara fama e si riunisce due volte all’anno per fornire ai direttori il proprio parere sulle priorità scientifiche dell’Istituto e su come sviluppare la strumentazione e l’infrastruttura tecnica per soddisfare al meglio le esigenze del programma di ricerca degli utenti. Il Consiglio Scientifico valuta inoltre la produzione scientifica dell’Istituto).

2014-2016

European Spallation Source (ESS, Lund, Svezia)

Membro dello **“Scientific Advisory Board” (SAC)** (ESS è la sorgente europea di nuova generazione, in fase di costruzione e che sarà operativa a partire dai prossimi anni. ESS è uno dei più grandi progetti di infrastrutture scientifiche e tecnologiche in corso di realizzazione, con un budget di circa 2 GEuro. Il SAC è composto da scienziati di punta internazionali non impiegati o comunque non immediatamente collegati all’ESS, e fornisce consulenza al Consiglio su questioni scientifiche e su altre questioni importanti per l’ESS.)

2010-2013

INCARICHI DA VALUTATORE DI PROPOSTE DI ESPERIMENTO

- Ente o Istituto
- Ruolo
- Data (anno accademico)

- Ente o Istituto
- Ruolo
- Data (anno accademico)

Di seguito l’elenco delle commissioni di cui ho fatto o faccio parte per la selezione delle proposte di esperimento di scattering di neutroni presso le più prestigiose sorgenti di neutroni al mondo.

Heinz Maier-Leibnitz Zentrum (Monaco, Germania)

Membro del review panel **“Biology”**

2014-

Oak Ridge National Laboratory (Oak Ridge, USA)

Membro del review committee **“Low Energy/Chemical Spectroscopy”**

2013-

- Ente o Istituto
 - Ruolo
- Data (anno accademico)

NIST Center for Neutron Research (Gaithersburg, USA)
 Membro del review panel **"Life Science"**
 2009-2010, 2013-2014, 2014-2015, 2015-2016

- Ente o Istituto
 - Ruolo
- Data (anno accademico)

Institut Laue-Langevin (Grenoble, Francia)
 Membro del review panel **"Structure and Dynamics of Biological Systems"**
 2006-2009

INCARICHI EDITORIALI

- Associate Editor
 - Data
- Review Editor
 - Data
- Guest Editor
 - Data

Frontiers in Physics
 2021-

Frontiers in Materials. Biomaterials and Bio-Inspired Materials
 2022-

Special Issue "Advanced neutron scattering and complementary techniques to study biological systems" per European Biophysics Journal
 Giugno 2008

- Reviewer per le riviste internazionali

Physical Review Letters, Journal of Physical Chemistry Letters, Nature Scientific Report, Biophysical Journal, European Biophysics Journal, Chemical Physics, Journal of Physical Chemistry B, Journal of Power Sources, Journal of Chemical Physics, Philosophical Magazine, Biochemistry, Royal Society Journal of Interface, European Journal of Physics, Physical Chemistry Chemical Physics, Biopolymers, Biointerfaces, International Journal of Biomacromoles, Journal of Raman Spectroscopy, Entropy, ChemBioChem, Frontiers in Physics

- Revisore di tesi di dottorato per le seguenti università nazionali

Università de La Sapienza (RM), Università Politecnica delle Marche (AN), Università di Roma 3 (RM), Università di Messina (ME)

- Membro di commissione di tesi di dottorato per le seguenti università internazionali

Université Grenoble-Alps (Grenoble, FR), Université Paris VII (Parigi, FR), Technische Universität München (Monaco, DE), Université Claude Bernard Lyon 1 (Lione, FR).

FELLOWSHIP O INCARICHI PRESSO ISTITUTI DI RICERCA, ESTERI E INTERNAZIONALI, DI ALTA QUALIFICAZIONE

- Fellowship
• Data
Visiting Scientist presso l'**Institut Laue-Langevin** (Grenoble, Francia)
01-28 Febbraio 2015
- Fellowship
• Data
Visiting Scientist presso l'**Institut Laue-Langevin** (Grenoble, Francia)
01-31 Dicembre 2012
- Posizione
• Data
Ricercatore per l'Istituto Nazionale per la Fisica della Materia (INFM)
presso l'**Institut Laue-Langevin** (Grenoble, Francia)
01/10/1998 – 31/08/2001

ATTIVITÀ DI DISSEMINAZIONE

INVITED TALKS E LECTURES A CONFERENZE, WORKSHOP E SCUOLE INTERNAZIONALI

- Titolo
• Scuola
• Data
Quasi-elastic neutron scattering. Basics and applications
“Giornate Didattiche” SISN
10 Settembre 2020
- Titolo
• Conferenza
• Data
Small molecule inhibitors of the SARS-CoV-2 main protease dimerization
as potential antivirals
Proteine 2022 (Pisa)
20 Maggio 2022
- Titolo
• Scuola
• Data
Inelastic neutron scattering in Biology: principles and applications
XXIV International School of Pure and Applied Biophysics,
30 Gennaio 2020
- Titolo
• Conferenza
• Data
Dynamical transition in human telomere G-quadruplexes and their
hydration water
7th International Meeting on Quadruplex Nucleic Acids, Changchun
(Cina)
5 Settembre 2019
- Titolo
• Conferenza
• Data
On the role of water vibrational dynamics for protein ligand binding
Telluride Science Research Center Workshop “Water Structure, Dynamics
and Thermodynamics in Biology” (Telluride, USA)
18 Giugno 2019

- Titolo Thermal unfolding of HT DNA quadruplexes. Structural and thermodynamic view
- Conferenza FISMAT International conference (Trieste, Italia)
- Data 3 Ottobre 2017

- Titolo On the complex collective dynamics of phospholipid membranes
- Conferenza 8th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems (Wisla Polonia)
- Data 24 Luglio 2017

- Titolo Fast internal dynamics of biomolecules and their hydration water. A neutron scattering spectroscopy-based view
- Conferenza International Workshop Frontiers in Water Biophysics (Erice, Italia)
- Data 26 Maggio 2017

- Titolo Low-frequency inelastic features of proteins and their role in biological functionality
- Conferenza II International Workshop on Brillouin Neutron Scattering (Roma, Italia)
- Data 12 Febbraio 2016

- Titolo Quasi Elastic Neutron Scattering fundamentals
- Scuola Advanced School of the Italian Neutron Scattering Society (Torino, Italia)
- Data 8 Settembre 2015

- Titolo Looking for the secrets of biological functionality with neutron scattering
- Conferenza Workshop of the Italian Neutron Scattering Society (Roma, Italia)
- Data 1 luglio 2015

- Titolo Low-frequency vibrational properties of biological water from inelastic incoherent and coherent neutron scattering
- Conferenza NORDITA (Nordic Institut for Theoretical Physics) "Water Program Workshop"
- Data 3 Novembre 2014

- Titolo Single particle and collective dynamics in the ps timescale. From biological water of cellular components to human cells
- Conferenza GORDON Research Conference on "Water and Aqueous Solutions" (Plymouth, USA)
- Data 30 Luglio 2014

- Titolo Protein dynamics in the high-temperature range: critical fluctuations at thermal melting
- Conferenza Telluride Science Research Center Workshop on "Protein Dynamics" (Les Houches, Svizzera)
- Data 24 Maggio 2014

- Titolo Relationship between dynamics and stability for biomolecules embedded in glassy matrices
- Conferenza Workshop "WOSAP (Workshop on Stability of Amorphous Pharmaceuticals) (Castiglioncello, Italia)
- Data 14 Ottobre 2013

- Titolo Vibrational dynamics changes of protein hydration water across the dynamical transition
- Conferenza 7th IDMRCS (International Discussion Meeting on Relaxation in Complex Systems) (Barcellona, Spagna)
- Data 23 Luglio 2013

- Titolo Elastic and quasielastic neutron scattering investigation of biomolecules in glassy environments
- Conferenza JNCS International Workshop "Trends and Perspectives in Neutron Scattering for Soft Matter and Biophysics" (Tutzing, DE)
- Data 23 Ottobre 2012

- Titolo "Vibrational features of the hydration water of a deuterated protein"
- Conferenza Workshop of the Italian Neutron Scattering Society (Sestri Levante, Italia)
- Data 18 Settembre 2007

- Titolo 'Glassy character of protein hydration water'
- Conferenza French-Japanese workshop for the study of protein dynamics and structure (Grenoble Francia)
- Data 12 Gennaio 2007

- Titolo Dynamical properties of biomolecules in bioprotectant matrices
- Conferenza International Workshop "Neutron Scattering Highlights on Biological Systems"(Taormina, Italia)
- Data 6 Ottobre 2006

- Titolo "Neutrons for studying fuel cells physics"
- Conferenza Workshop of the Italian Neutron Scattering Society (Sirolo, Italia)
- Data 9 Luglio 2006

ALTRE PRESENTAZIONI ORALI

2013 Ottobre. ENEA CR Frascati. Meeting "Spettroscopia neutronica per sistemi di stoccaggio dell'idrogeno nei metalli". Title "Diffusione Quasi Elastica di neutroni: moti diffusivi dell'idrogeno"

2012 Marzo. Andalo. XII International Workshop on Complex and Disordered Systems. Title: "Vibrational collective dynamics of dry and hydrated proteins in the Terahertz region"

2011 Gennaio. Grenoble. Workshop "Protein Dynamics Data Bank". Title: "Collective dynamics of biomolecules as affected by hydration"

2010 Marzo. Andalo. XII International Workshop on Complex and Disordered Systems. Title: 'Single particle and collective dynamics of protein hydration water "

2009 Settembre. Roma. Congresso internazionale IDMRCS6. Title: "Collective dynamics of protein hydration water "

2008 Ottobre. Grenoble. Workshop "Biological Physics at Large Facilities". Title: "Confined diffusive dynamics of protein hydration water"

2008 Settembre. Monaco. Workshop "Biomolecular Dynamics". title: "Single particle and collective dynamics of protein hydration water"

2008 Marzo. Andalo. XI International Workshop "Complex and disordered systems". Title: "Similarity of protein hydration water and amorphous ice".

2006 Marzo. Grenoble. Workshop "Dynamics in confinement". Title: 'Temperature dependent dynamics of water confined in Nafion membranes'

2005 Novembre. Frascati. Workshop "Nanoscience&Nanotechnology". Title: 'Dynamics of water confined in fuel cell Nafion membranes with and without nanofiller'

2005 Ottobre. Assisi. Workshop "New proton conducting membranes and electrodes for PEM FCs". Title: 'Temperature dependent dynamics of water confined in Nafion membranes'

2005 Settembre. Grenoble (FR). Workshop "Neutrons in Biology". Title: 'Stability of biomolecules in bioprotectant matrices'

2003 Giugno. Genova. Congresso della Società Italiana di Spettroscopia Neutronica. Title: "Vibrational features of proteins in glycerol-water and glucose-water glassy matrices"

2003 Giugno. Grenoble. Workshop "IN13 users meeting". Title: "Thermal stability and internal dynamics of lysozyme as affected by hydration"

2002 Settembre. Potsdam (DE). "Quasielastic Neutron Scattering Conference QENS". Title: 'Protein dynamics on the picosecond timescale as affected by the environment: a quasielastic neutron scattering study'

2001 Giugno. Grenoble. Workshop "IN13 users meeting". Title: "Dynamics of proteins: comparison between neutron scattering and molecular dynamics"

1999 Novembre. Genova. Congresso della Società Italiana di Spettroscopia Neutronica. Title: 'Il CRG IN13: uno spettrometro per studi di biosistemi'.

1999 Settembre. Pavia. Convegno della Società Italiana di Fisica. Title: "Dinamica delle proteine: confronto tra scattering di neutroni e dinamica molecolare".

1999 Giugno. Genova. Congresso INFMeeting. Title: "Neutron scattering evidence of a boson peak in protein hydration water "

1998 Dicembre. Grenoble. Workshop 'Neutron and Numerical Methods'. Title: "Low frequency anomalies in Copper Azurin: a comparison between neutron scattering and molecular dynamics simulation "

1998 Giugno. Rimini. Congresso INFMeeting. Title: "Incoherent Neutron Scattering of copper Azurin: a comparison with Molecular Dynamics simulation results"

1997 Ottobre - Congresso Nazionale INFM sez. B, Viterbo. Title: "Molecular Dynamics simulations to investigate the protein dynamics"

ORGANIZZAZIONE SCUOLE E CONGRESSI

- Evento
• Ruolo
• Data
 - Evento
• Ruolo
• Data
 - Evento
• Ruolo
• Data
 - Evento
• Ruolo
• Data
- Workshop internazionale "**New science from time-focusing neutron spectroscopy at the ESS**" (Taormina, Italia)
Organizzatore principale
3-5 Ottobre 2013
- Workshop internazionale "**Proteins at Work 2007**" (Perugia, Italia)
Organizzatore principale
28-30 Maggio 2007
- Giornate Didattiche della Società Italiana di Spettroscopia Neutronica** (Sirolo, AN)
Direttore
27 Giugno – 6 Luglio 2009
- Congresso della Società Italiana di Spettroscopia Neutronica**
Membro del comitato scientifico
2002, 2003, 2004, 2005, 2021, 2022

PUBBLICAZIONI INTERNAZIONALI PEER REVIEWED

Fonte: Scopus 26/11/2022

h-index = 27, 121 peer reviewed papers, 2630 citations

1. Rosi B.P., D'Angelo A., Buratti E., Zanatta M., Tavagnacco L., Natali F., Zamponi M., Noferini D., Corezzi S., Zaccarelli E., Comez L., Sacchetti F., Paciaroni A., Petrillo C., Orecchini A., Impact of the Environment on the PNIPAM Dynamical Transition Probed by Elastic Neutron Scattering" (2022), *Macromolecules*, 55 (11) 4752-4765
2. Singh M., Gupta R., Comez L., Paciaroni A., Rani R., Kumar V. BCL2 G quadruplex-binding small molecules: Current status and prospects for the development of next-generation anti-cancer therapeutics (2022), *Drug Discovery Today*. Doi: 10.1016/j.drudis.2022.06.002
3. Libera, V., Bianchi, F., Rossi, B., D'Amico, F., Masciovecchio, C., Petrillo, P., Sacchetti, F., Paciaroni, A. and Comez, L.

Solvent Vibrations as a Proxy of the Telomere G-Quadruplex Rearrangements across Thermal Unfolding
(2022) *Int. J. Mol. Sci.* 23 (9), 5123

4. Silvestrini, L., Belhaj, N., Comez, L., Gerelli, Y., Lauria, A., Libera, V., Mariani, P., Marzullo, P., Ortore, M.G., Palumbo Piccionello, A., Petrillo, C., Savini, L., Paciaroni, A., Spinozzi, F.
The dimer-monomer equilibrium of SARS-CoV-2 main protease is affected by small molecule inhibitors
(2021) *Scientific Reports*, 11 (1), art. no. 9283.
5. Libera, V., Andreeva, E.A., Martel, A., Thureau, A., Longo, M., Petrillo, C., Paciaroni, A., Schirò, G., Comez, L.
Porphyrin Binding and Irradiation Promote G-Quadruplex DNA Dimeric Structure
(2021) *Journal of Physical Chemistry Letters*, 12 (33), pp. 8096-8102.
6. Bottari, C., Catalini, S., Foggi, P., Mancini, I., Mele, A., Perinelli, D.R., Paciaroni, A., Gessini, A., Masciovecchio, C., Rossi, B.
Base-specific pre-melting and melting transitions of DNA in presence of ionic liquids probed by synchrotron-based UV resonance Raman scattering
(2021) *Journal of Molecular Liquids*, 330, art. no. 115433.
7. Comez, L., Gentili, P.L., Paolantoni, M., Paciaroni, A., Sassi, P.
Heat-induced self-assembling of BSA at the isoelectric point
(2021) *International Journal of Biological Macromolecules*, 177, pp. 40-47.
8. Schirò, G., Fichou, Y., Brogan, A.P.S., Sessions, R., Lohstroh, W., Zamponi, M., Schneider, G.J., Gallat, F.-X., Paciaroni, A., Tobias, D.J., Perriman, A., Weik, M.
Diffusivelike Motions in a Solvent-Free Protein-Polymer Hybrid
(2021) *Physical Review Letters*, 126 (8), art. no. 088102.
9. Capaccioli, S., Zheng, L., Kyritsis, A., Paciaroni, A., Vogel, M., Ngai, K.L.
The Dynamics of Hydrated Proteins Are the Same as Those of Highly Asymmetric Mixtures of Two Glass-Formers
(2021) *ACS Omega*, 6 (1), pp. 340-347.
10. Katava, M., Stirnemann, G., Pachetti, M., Capaccioli, S., Paciaroni, A., Sterpone, F.
Specific Interactions and Environment Flexibility Tune Protein Stability under Extreme Crowding
(2021) *Journal of Physical Chemistry B*.

11. Paciaroni, A., Comez, L., Longo, M., Sebastiani, F., Bianchi, F., Orecchini, A., Zanatta, M., Verbeni, R., Bosak, A., Sacchetti, F., Petrillo, C.
Terahertz collective dynamics of DNA as affected by hydration and counterions
(2020) *Journal of Molecular Liquids*, 318, art. no. 113956.
12. Comez, L., Bianchi, F., Libera, V., Longo, M., Petrillo, C., Sacchetti, F., Sebastiani, F., D'Amico, F., Rossi, B., Gessini, A., Masciovecchio, C., Amenitsch, H., Sissi, C., Paciaroni, A.
Polymorphism of human telomeric quadruplexes with drugs: A multi-technique biophysical study
(2020) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22 (20), pp. 11583-11592.
13. Andersen, K.H., Argyriou, D.N., Jackson, A.J., Houston, J., Henry, P.F., Deen, P.P., Toft-Petersen, R., Beran, P., Strobl, M., Arnold, T., Wacklin-Knecht, H., Tsapatsaris, N., Oksanen, E., Woracek, R., Schweika, W., Mannix, D., Hiess, A., Kennedy, S., Kirstein, O., Petersson Årsköld, S., Taylor, J., Hagen, M.E., Laszlo, G., Kanaki, K., Piscitelli, F., Khaplanov, A., Stefanescu, I., Kittelmann, T., Pfeiffer, D., Hall-Wilton, R., Lopez, C.I., Aprigliano, G., Whitelegg, L., Moreira, F.Y., Olsson, M., Bordallo, H.N., Martín-Rodríguez, D., Schneider, H., Sharp, M., Hartl, M., Nagy, G., Ansell, S., Pullen, S., Vickery, A., Fedrigo, A., Mezei, F., Arai, M., Heenan, R.K., Halcrow, W., Turner, D., Raspino, D., Orszulik, A., Cooper, J., Webb, N., Galsworthy, P., Nightingale, J., Langridge, S., Elmer, J., Frielinghaus, H., Hanslik, R., Gussen, A., Jaksch, S., Engels, R., Kozielowski, T., Butterweck, S., Feygenson, M., Harbott, P., Poqué, A., Schwaab, A., Lieutenant, K., Violini, N., Voigt, J., Brückel, T., Koenen, M., Kämmerling, H., Babcock, E., Salhi, Z., Wischnewski, A., Heynen, A., Désert, S., Jestin, J., Porcher, F., Fabrèges, X., Fabrèges, G., Annighöfer, B., Klimko, S., Dupont, T., Robillard, T., Goukassov, A., Longeville, S., Alba-Simionesco, C., Bourges, P., Guyon Le Bouffy, J., Lavie, P., Rodrigues, S., Calzada, E., Lerche, M., Schillinger, B., Schmakat, P., Schulz, M., Seifert, M., Lohstroh, W., Petry, W., Neuhaus, J., Loaiza, L., Tartaglione, A., Glavic, A., Schütz, S., Stahn, J., Lehmann, E., Morgano, M., Schefer, J., Filges, U., Klauser, C., Niedermayer, C., Fenske, J., Nowak, G., Rouijaa, M., Siemers, D.J., Kiehn, R., Müller, M., Carlsen, H., Udby, L., Lefmann, K., Birk, J.O., Holm-Dahlin, S., Bertelsen, M., Hansen, U.B., Olsen, M.A., Christensen, M., Iversen, K., Christensen, N.B., Rønnow, H.M., Freeman, P.G., Hauback, B.C., Kolevator, R., Llamas-Jansa, I., Orecchini, A., Sacchetti, F., Petrillo, C., Paciaroni, A., Tozzi, P., Zanatta, M., Luna, P., Herranz, I., del Moral, O.G., Huerta, M., Magán, M., Mosconi, M., Abad, E., Aguilar, J., Stepanyan, S., Bakedano, G., Vivanco, R., Bustinduy, I., Sordo, F., Martínez, J.L., Lechner, R.E., Villacorta, F.J., Šaroun, J., Lukáš, P., Markó, M.,

Zanetti, M., Bellissima, S., del Rosso, L., Masi, F., Bovo, C., Chowdhury, M., De Bonis, A., Di Fresco, L., Scatigno, C., Parker, S.F., Fernandez-Alonso, F., Colognesi, D., Senesi, R., Andreani, C., Gorini, G., Scionti, G., Schreyer, A.
The instrument suite of the European Spallation Source
(2020) Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 957, art. no. 163402.

14. Nibali, V.C., Wanderlingh, U., D'Angelo, G., Branca, C., Francesco, A.D.E., Petrillo, C., Paciaroni, A., Sacchetti, F.
Transverse THz dynamics of phospholipid membranes: A neutron scattering study
(2020) AAPP Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti, Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali, 98.
15. Nibali, V.C., Branca, C., Paciaroni, A., Wanderlingh, U., D'Angelo, G.
Coherent collective dynamics in phospholipid membranes: Where are we now?
(2020) AAPP Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti, Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali, 98.
16. Zanatta, M., Andersen, K.H., Deen, P.P., Orecchini, A., Paciaroni, A., Petrillo, C., Sacchetti, F.
Disentangling time-focusing from beam divergence: A novel approach for high-flux thermal neutron spectroscopy at continuous and long-pulse sources
(2019) Review of Scientific Instruments, 90 (9), art. no. 095101.
17. Ngai, K.L., Hong, L., Capaccioli, S., Paciaroni, A.
Uncovering a novel transition in the dynamics of proteins in the dry state
(2019) Journal of Molecular Liquids, 286, art. no. 110810.
18. Russo, D., De Angelis, A., Paciaroni, A., Frick, B., De Sousa, N., Wurm, F.R., Teixeira, J.
Protein-Polymer Dynamics as Affected by Polymer Coating and Interactions
(2019) Langmuir, 35 (7), pp. 2674-2679.
19. Fernandez-Castanon, J., Zanatta, M., Comez, L., Paciaroni, A., Radulescu, A., Sciortino, F.
All-DNA System Close to the Percolation Threshold
(2019) ACS Macro Letters, 8 (1), pp. 84-87.
20. Venuti, V., Corsaro, C., Stancanelli, R., Paciaroni, A., Crupi, V., Tommasini, S., Ventura, C.A., Majolino, D.

Analysis of the thermal fluctuations in inclusion complexes of genistein with β -cyclodextrin derivatives
(2019) *Chemical Physics*, 516, pp. 125-131.

21. Bianchi, F., Comez, L., Biehl, R., D'Amico, F., Gessini, A., Longo, M., Masciovecchio, C., Petrillo, C., Radulescu, A., Rossi, B., Sacchetti, F., Sebastiani, F., Violini, N., Paciaroni, A. Structure of human telomere G-quadruplex in the presence of a model drug along the thermal unfolding pathway
(2018) *Nucleic Acids Research*, 46 (22), pp. 11927-11938.
22. Rossi, B., Bottari, C., Comez, L., Corezzi, S., Paolantoni, M., Gessini, A., Masciovecchio, C., Mele, A., Punta, C., Melone, L., Fiorati, A., Radulescu, A., Mangiapia, G., Paciaroni, A. Structural and molecular response in cyclodextrin-based pH-sensitive hydrogels by the joint use of Brillouin, UV Raman and Small Angle Neutron Scattering techniques
(2018) *Journal of Molecular Liquids*, 271, pp. 738-746.
23. Cherin, M., Iurino, D.A., Zanatta, M., Fernandez, V., Paciaroni, A., Petrillo, C., Rettori, R., Sardella, R. Synchrotron radiation reveals the identity of the large felid from Monte Argentario (Early Pleistocene, Italy)
(2018) *Scientific Reports*, 8 (1), art. no. 8338.
24. D'Angelo, G., Nibali, V.C., Wanderlingh, U., Branca, C., De Francesco, A., Sacchetti, F., Petrillo, C., Paciaroni, A. Multiple Interacting Collective Modes and Phonon Gap in Phospholipid Membranes
(2018) *Journal of Physical Chemistry Letters*, 9 (15), pp. 4367-4372.
25. Katava, M., Stirnemann, G., Zanatta, M., Capaccioli, S., Pachetti, M., Ngai, K.L., Sterpone, F., Paciaroni, A. Critical structural fluctuations of proteins upon thermal unfolding challenge the Lindemann criterion
(2017) *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 114 (35), pp. 9361-9366.
26. Rahaman, O., Kalimeri, M., Katava, M., Paciaroni, A., Sterpone, F. Configurational Disorder of Water Hydrogen-Bond Network at the Protein Dynamical Transition
(2017) *Journal of Physical Chemistry B*, 121 (28), pp. 6792-6798.
27. Zanatta, M., Barocchi, F., De Francesco, A., Farhi, E., Formisano, F., Guarini, E., Laloni, A., Orecchini, A., Paciaroni, A., Petrillo, C., Pilgrim, W.-C., Suck, J.-B., Sacchetti, F. A high-flux upgrade for the BRISP spectrometer at ILL

- (2017) Review of Scientific Instruments, 88 (5), art. no. 053905.
28. Niessen, K.A., Xu, M., Paciaroni, A., Orecchini, A., Snell, E.H., Markelz, A.G.
Moving in the Right Direction: Protein Vibrational Steering Function
(2017) Biophysical Journal, 112 (5), pp. 933-942.
 29. D'Angelo, G., Conti Nibali, V., Crupi, C., Rifici, S., Wanderslingh, U., Paciaroni, A., Sacchetti, F., Branca, C.
Probing Intermolecular Interactions in Phospholipid Bilayers by Far-Infrared Spectroscopy
(2017) Journal of Physical Chemistry B, 121 (6), pp. 1204-1210.
 30. Katava, M., MacCarini, M., Villain, G., Paciaroni, A., Sztucki, M., Ivanova, O., Madern, D., Sterpone, F.
Thermal activation of allosteric-like' large-scale motions in a eukaryotic Lactate Dehydrogenase
(2017) Scientific Reports, 7, art. no. 41092.
 31. Rossi, B., Paciaroni, A., Venuti, V., Fadda, G.C., Melone, L., Punta, C., Crupi, V., Majolino, D., Mele, A.
SANS investigation of water adsorption in tunable cyclodextrin-based polymeric hydrogels
(2017) Physical Chemistry Chemical Physics, 19 (8), pp. 6022-6029.
 32. Ngai, K.L., Capaccioli, S., Paciaroni, A.
Dynamics of hydrated proteins and bio-protectants: Caged dynamics, β -relaxation, and α -relaxation
(2017) Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects, 1861 (1), pp. 3553-3563.
 33. Zanatta, M., Orecchini, A., Aisa, S., Casinini, F., Farnesini, L., Deen, P.P., Paciaroni, A., Petrillo, C., Sacchetti, F.
A large-area double rotating-crystal monochromator for time-focusing neutron instruments
(2016) Journal of Physics: Conference Series, 746 (1), art. no. 012002.
 34. Fernandez-Castanon, J., Bomboi, F., Rovigatti, L., Zanatta, M., Paciaroni, A., Comez, L., Porcar, L., Jafta, C.J., Fadda, G.C., Bellini, T., Sciortino, F.
Small-angle neutron scattering and molecular dynamics structural study of gelling DNA nanostars
(2016) Journal of Chemical Physics, 145 (8), art. no. 084910.
 35. Amann-Winkel, K., Bellissent-Funel, M.-C., Bove, L.E., Loerting, T., Nilsson, A., Paciaroni, A., Schlesinger, D., Skinner, L.

X-ray and Neutron Scattering of Water
(2016) *Chemical Reviews*, 116 (13), pp. 7570-7589.

36. Sebastiani, F., Longo, M., Orecchini, A., Comez, L., De Francesco, A., Muthmann, M., Teixeira, S.C.M., Petrillo, C., Sacchetti, F., Paciaroni, A.
Hydration-dependent dynamics of human telomeric oligonucleotides in the picosecond timescale: A neutron scattering study
(2015) *Journal of Chemical Physics*, 143 (1), art. no. 015102.
37. Zanatta, M., Sacchetti, F., Guarini, E., Orecchini, A., Paciaroni, A., Sani, L., Petrillo, C.
Collective ion dynamics in liquid zinc: Evidence for complex dynamics in a non-free-electron liquid metal
(2015) *Physical Review Letters*, 114 (18), art. no. 187801.
38. Rossi, B., Venuti, V., Paciaroni, A., Mele, A., Longeville, S., Natali, F., Crupi, V., Majolino, D., Trotta, F.
Thermal fluctuations in chemically cross-linked polymers of cyclodextrins
(2015) *Soft Matter*, 11 (11), pp. 2183-2192.
39. Schirò, G., Fichou, Y., Gallat, F.-X., Wood, K., Gabel, F., Moulin, M., Härtlein, M., Heyden, M., Colletier, J.-P., Orecchini, A., Paciaroni, A., Wuttke, J., Tobias, D.J., Weik, M.
Translational diffusion of hydration water correlates with functional motions in folded and intrinsically disordered proteins
(2015) *Nature Communications*, 6, art. no. 6490.
40. Paciaroni, A., Orecchini, A., Sebastiani, F., Capaccioli, S., Ngai, K.L., Moulin, M., Haertlein, M., Petrillo, C., Sacchetti, F.
Vibrational dynamics changes of protein hydration water across the dynamic transition
(2015) *Journal of Non-Crystalline Solids*, 407, pp. 465-471.
41. Longo, M., Marconi, M., Orecchini, A., Petrillo, C., Monaco, G., Calvitti, M., Pirisinu, I., Romani, R., Sacchetti, F., Sebastiani, F., Zanatta, M., Paciaroni, A.
Terahertz dynamics in human cells and their chromatin
(2014) *Journal of Physical Chemistry Letters*, 5 (13), pp. 2177-2181.
42. Sebastiani, F., Pietrini, A., Longo, M., Comez, L., Petrillo, C., Sacchetti, F., Paciaroni, A.
Melting of DNA nonoriented fibers: A wide-angle x-ray diffraction study
(2014) *Journal of Physical Chemistry B*, 118 (14), pp. 3785-3792.

43. Conti Nibali, V., D'Angelo, G., Paciaroni, A., Tobias, D.J., Tarek, M.
On the coupling between the collective dynamics of proteins and their hydration water
(2014) *Journal of Physical Chemistry Letters*, 5 (7), pp. 1181-1186.
44. Crupi, V., Fontana, A., Giarola, M., Longeville, S., Majolino, D., Mariotto, G., Mele, A., Paciaroni, A., Rossi, B., Trotta, F., Venuti, V.
Vibrational density of states and elastic properties of cross-linked polymers: Combining inelastic light and neutron scattering
(2014) *Journal of Physical Chemistry B*, 118 (2), pp. 624-633.
45. Crupi, V., Guella, G., Longeville, S., Majolino, D., Mancini, I., Paciaroni, A., Rossi, B., Venuti, V.
Influence of chirality on vibrational and relaxational properties of (S)- and (R, S)-ibuprofen/methyl- β -cyclodextrin inclusion complexes: An INS and QENS study
(2013) *Journal of Physical Chemistry B*, 117 (39), pp. 11466-11472.
46. Russo, D., Ortore, M.G., Spinozzi, F., Mariani, P., Loupiac, C., Annighofer, B., Paciaroni, A.
The impact of high hydrostatic pressure on structure and dynamics of β -lactoglobulin
(2013) *Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects*, 1830 (10), pp. 4974-4980.
47. Sebastiani, F., Orecchini, A., Paciaroni, A., Jasnin, M., Zaccai, G., Moulin, M., Haertlein, M., De Francesco, A., Petrillo, C., Sacchetti, F.
Collective THz dynamics in living *Escherichia coli* cells
(2013) *Chemical Physics*, 424, pp. 84-88.
48. Ngai, K.L., Capaccioli, S., Paciaroni, A.
Nature of the water specific relaxation in hydrated proteins and aqueous mixtures
(2013) *Chemical Physics*, 424, pp. 37-44.
49. Ngai, K.L., Capaccioli, S., Paciaroni, A.
Change of caged dynamics at T_g in hydrated proteins: Trend of mean squared displacements after correcting for the methyl-group rotation contribution
(2013) *Journal of Chemical Physics*, 138 (23), art. no. 235102.
50. Paciaroni, A., Conti Nibali, V., Orecchini, A., Petrillo, C., Haertlein, M., Moulin, M., Tarek, M., D'Angelo, G., Sacchetti, F.
Vibrational excitations of proteins and their hydration water in the far-infrared range

(2013) *Chemical Physics*, 424, pp. 80-83.

51. Crupi, V., Fontana, A., Giarola, M., Guella, G., Majolino, D., Mancini, I., Mariotto, G., Paciaroni, A., Rossi, B., Venuti, V.
Cyclodextrin-complexation effects on the low-frequency vibrational dynamics of ibuprofen by combined inelastic light and neutron scattering experiments
(2013) *Journal of Physical Chemistry B*, 117 (14), pp. 3917-3926.
52. Paciaroni, A., Orecchini, A., Goracci, G., Cornicchi, E., Petrillo, C., Sacchetti, F.
Glassy character of DNA hydration water
(2013) *Journal of Physical Chemistry B*, 117 (7), pp. 2026-2031.
53. Comez, L., Corezzi, S., Orecchini, A., Paciaroni, A., Petrillo, C., Santucci, S.C., Sacchetti, F., Fioretto, D.
A comparison between acoustic compliance and self-particle susceptibility in associated liquids: The case of water and glycerol
(2012) *Journal of Molecular Liquids*, 176, pp. 76-78.
54. Violini, N., Orecchini, A., Paciaroni, A., Petrillo, C., Sacchetti, F.
Neutron scattering investigation of high-frequency dynamics in glassy glucose
(2012) *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 85 (13), art. no. 134204.
55. Paciaroni, A., Orecchini, A., Haertlein, M., Moulin, M., Conti Nibali, V., De Francesco, A., Petrillo, C., Sacchetti, F.
Vibrational collective dynamics of dry proteins in the terahertz region
(2012) *Journal of Physical Chemistry B*, 116 (12), pp. 3861-3865.
56. Capaccioli, S., Ngai, K.L., Ancherbak, S., Paciaroni, A.
Evidence of coexistence of change of caged dynamics at T_g and the dynamic transition at T_d in solvated proteins
(2012) *Journal of Physical Chemistry B*, 116 (6), pp. 1745-1757.
57. Orecchini, A., Paciaroni, A., Petrillo, C., Sebastiani, F., De Francesco, A., Sacchetti, F.
Water dynamics as affected by interaction with biomolecules and change of thermodynamic state: A neutron scattering study
(2012) *Journal of Physics Condensed Matter*, 24 (6), art. no. 064105.

58. Orecchini, A., Sebastiani, F., Jasnin, M., Paciaroni, A., De Francesco, A., Petrillo, C., Moulin, M., Haertlein, M., Zaccai, G., Sacchetti, F.
Collective dynamics of intracellular water in living cells
(2012) *Journal of Physics: Conference Series*, 340, art. no. 012091.
59. Violini, N., Cornicchi, E., Orecchini, A., Paciaroni, A., Petrillo, C., Sacchetti, F.
Vibrational density of states measurements in disordered systems
(2012) *Journal of Physics: Conference Series*, 340, art. no. 012082.
60. Cornicchi, E., Sebastiani, F., De Francesco, A., Orecchini, A., Paciaroni, A., Petrillo, C., Sacchetti, F.
Collective density fluctuations of DNA hydration water in the time-window below 1 ps
(2011) *Journal of Chemical Physics*, 135 (2), art. no. 025101.
61. Crupi, V., Majolino, D., Mazzaglia, A., Paciaroni, A., Stancanelli, R., Tommasini, S., Venuti, V.
Chiral recognition and complexation behaviour of β -CyD vs. l- and dl-serine by FTIR-ATR spectroscopy
(2011) *Journal of Molecular Structure*, 993 (1-3), pp. 376-381.
62. Crupi, V., Guella, G., Majolino, D., Mancini, I., Paciaroni, A., Rossi, B., Venuti, V., Verrocchio, P., Viliiani, G.
Effect of the chiral discrimination on the vibrational properties of (R)-, (S)- and (R, S)-ibuprofen/methyl- β -cyclodextrin inclusion complexes
(2011) *Philosophical Magazine*, 91 (13-15), pp. 1776-1785.
63. Comez, L., Monaco, G., Masciovecchio, C., Paciaroni, A., Gesini, A., Scarponi, F., Ruocco, G., Fioretto, D.
Acoustic dissipation and density of states in liquid, supercooled, and glassy glycerol
(2011) *Physical Review Letters*, 106 (15), art. no. 155701.
64. Comez, L., Monaco, G., Masciovecchio, C., Paciaroni, A., Gesini, A., Scarponi, F., Ruocco, G., Fioretto, D.
Longitudinal acoustic compliance and tagged particle susceptibility in liquid and supercooled glycerol
(2011) *Journal of Non-Crystalline Solids*, 357 (2), pp. 515-517.
65. Crupi, V., Majolino, D., Paciaroni, A., Rossi, B., Stancanelli, R., Venuti, V., Viliiani, G.
The effect of hydrogen bond on the vibrational dynamics of genistein free and complexed with β -cyclodextrins
(2010) *Journal of Raman Spectroscopy*, 41 (7), pp. 764-770.

66. Perticaroli, S., Comez, L., Paolantoni, M., Sassi, P., Lupi, L., Fioretto, D., Paciaroni, A., Morresi, A.
Broadband depolarized light scattering study of diluted protein aqueous solutions
(2010) *Journal of Physical Chemistry B*, 114 (24), pp. 8262-8269.
67. Bove, L.E., Klotz, S., Paciaroni, A., Sacchetti, F.
Anomalous proton dynamics in ice at low temperatures
(2009) *Physical Review Letters*, 103 (16), art. no. 165901.
68. Paciaroni, A., Cornicchi, E., Marconi, M., Orecchini, A., Petrillo, C., Haertlein, M., Moulin, M., Sacchetti, F.
Coupled relaxations at the protein-water interface in the picosecond time scale
(2009) *Journal of the Royal Society Interface*, 6 (SUPPL. 5), pp. S635-S640.
69. Ortore, M.G., Spinozzi, F., Mariani, P., Paciaroni, A., Barbosa, L.R.S., Amenitsch, H., Steinhart, M., Ollivier, J., Russo, D.
Combining structure and dynamics: Non-denaturing high-pressure effect on lysozyme in solution
(2009) *Journal of the Royal Society Interface*, 6 (SUPPL. 5), pp. S619-S634.
70. Bellezza, F., Cipiciani, A., Cinelli, S., Esposito, A., Onori, G., Paciaroni, A.
Influence of methanol on catalytic activity, stability and internal dynamics of myoglobin
(2009) *Chemical Physics Letters*, 478 (4-6), pp. 260-265.
71. Crupi, V., Majolino, D., Paciaroni, A., Stancanelli, R., Venuti, V.
Influence of the "host-guest" interactions on the mobility of genistein/ β -cyclodextrin inclusion complex
(2009) *Journal of Physical Chemistry B*, 113 (31), pp. 11032-11038.
72. Orecchini, A., Paciaroni, A., De Francesco, A., Petrillo, C., Sacchetti, F.
Collective dynamics of protein hydration water by brillouin neutron spectroscopy
(2009) *Journal of the American Chemical Society*, 131 (13), pp. 4664-4669.
73. Paciaroni, A., Orecchini, A., Cornicchi, E., Marconi, M., Petrillo, C., Haertlein, M., Moulin, M., Sacchetti, F.
Coupled thermal fluctuations of proteins and protein hydration water on the picosecond timescale
(2008) *Philosophical Magazine*, 88 (33-35), pp. 4071-4077.

74. Paciaroni, A., Orecchini, A., Cornicchi, E., Marconi, M., Petrillo, C., Haertlein, M., Moulin, M., Schober, H., Tarek, M., Sacchetti, F.
Fingerprints of amorphous icelike behavior in the vibrational density of states of protein hydration water
(2008) *Physical Review Letters*, 101 (14), art. no. 148104.
75. Paciaroni, A.
Advanced neutron scattering and complementary techniques to study biological systems
(2008) *European Biophysics Journal*, 37 (5), p. 529.
76. Cornicchi, E., Capponi, S., Marconi, M., Onori, G., Paciaroni, A.
Thermal fluctuations of DNA enclosed by glycerol-water glassy matrices: An elastic neutron scattering investigation
(2008) *European Biophysics Journal*, 37 (5), pp. 583-590.
77. Cornicchi, E., De Francesco, A., Marconi, M., Onori, G., Paciaroni, A.
A relationship between solvent viscosity and biomolecule picosecond thermal fluctuations
(2008) *Chemical Physics*, 345 (2-3), pp. 219-223.
78. Librizzi, F., Vitrano, E., Paciaroni, A., Cordone, L.
Elastic neutron scattering of dry and rehydrated trehalose coated carboxy-myoglobin
(2008) *Chemical Physics*, 345 (2-3), pp. 283-288.
79. Marconi, M., Cornicchi, E., Onori, G., Paciaroni, A.
Comparative study of protein dynamics in hydrated powders and in solutions: A neutron scattering investigation
(2008) *Chemical Physics*, 345 (2-3), pp. 224-229.
80. Wood, K., Frölich, A., Paciaroni, A., Moulin, M., Härtlein, M., Zaccai, G., Tobias, D.J., Weik, M.
Coincidence of dynamical transitions in a soluble protein and its hydration water: Direct measurements by neutron scattering and MD simulations
(2008) *Journal of the American Chemical Society*, 130 (14), pp. 4586-4587.
81. Francesca, N., Peters, J., Russo, D., Barbieri, S., Chiapponi, C., Cupane, A., Deriu, A., Di Bari, M.T., Farhi, E., Gerelli, Y., Mariani, P., Paciaroni, A., Rivasseau, C., Schirò, G., Sonvico, F.
IN13 backscattering spectrometer at ILL: Looking for motions in biological macromolecules and organisms
(2008) *Neutron News*, 19 (4), pp. 14-18.

82. Orecchini, A., Paciaroni, A., De Francesco, A., Sani, L., Marconi, M., Laloni, A., Guarini, E., Formisano, F., Petrillo, C., Sacchetti, F.
Brillouin spectroscopy of protein hydration water: New experimental potentialities opened up by the thermal neutron spectrometer BRISP
(2008) *Measurement Science and Technology*, 19 (3), art. no. 034026.
83. Cornicchi, E., Capponi, S., Marconi, M., Onori, G., Paciaroni, A.
Temperature dependence of fast fluctuations in single- and double-stranded DNA molecules: A neutron scattering investigation
(2007) *Philosophical Magazine*, 87 (3-5), pp. 509-515.
84. Paciaroni, A., Casciola, M., Cornicchi, E., Marconi, M., Onori, G., Donnadio, A., Sganappa, M., De Francesco, A.
Low-frequency dynamics of water absorbed in Nafion membranes as a function of temperature
(2007) *Philosophical Magazine*, 87 (3-5), pp. 477-483.
85. Calandrini, V., Deriu, A., Onori, G., Paciaroni, A., Telling, M.T.F.
Pressure effect on water dynamics in tert-butyl alcohol/water solutions
(2006) *Journal of Physics Condensed Matter*, 18 (36), art. no. S10, pp. S2363-S2371.
86. Paciaroni, A., Cornicchi, E., De Francesco, A., Marconi, M., Onori, G.
Conditioning action of the environment on the protein dynamics studied through elastic neutron scattering
(2006) *European Biophysics Journal*, 35 (7), pp. 591-599.
87. Paciaroni, A., Casciola, M., Cornicchi, E., Marconi, M., Onori, G., Pica, M., Narducci, R., De Francesco, A., Orecchini, A.
Dynamics of water confined in fuel cell Nafion membranes containing zirconium phosphate nanofiller
(2006) *Journal of Physics Condensed Matter*, 18 (33), art. no. S18, pp. S2029-S2038.
88. Paciaroni, A., Casciola, M., Cornicchi, E., Marconi, M., Onori, G., Pica, M., Narducci, R.
Temperature-dependent dynamics of water confined in nafion membranes
(2006) *Journal of Physical Chemistry B*, 110 (28), pp. 13769-13776.
89. Cornicchi, E., Marconi, M., Onori, G., Paciaroni, A.

Controlling the protein dynamical transition with sugar-based bioprotectant matrices: A neutron scattering study (2006) *Biophysical Journal*, 91 (1), pp. 289-297.

90. Marconi, M., De Francesco, A., Cornicchi, E., Onori, G., Paciaroni, A.
Hydration and temperature dependent dynamics of lysozyme in glucose-water matrices. A neutron scattering study (2005) *Chemical Physics*, 317 (2-3), pp. 274-281.
91. Cornicchi, E., Onori, G., Paciaroni, A.
Picosecond-time-scale fluctuations of proteins in glassy matrices: The role of viscosity (2005) *Physical Review Letters*, 95 (15), art. no. 158104.
92. Paciaroni, A., Cinelli, S., Cornicchi, E., De Francesco, A., Onori, G.
Fast fluctuations in protein powders: The role of hydration (2005) *Chemical Physics Letters*, 410 (4-6), pp. 400-403.
93. Cinelli, S., Freda, M., Onori, G., Paciaroni, A., Santucci, A.
Hydration-dependent internal dynamics of macromolecules: A neutron scattering study (2005) *Journal of Molecular Liquids*, 117 (1-3), pp. 99-105.
94. Orecchini, A., Paciaroni, A.
High-temperature dynamical transition in β -lactoglobulin (2004) *Physica B: Condensed Matter*, 350 (1-3 SUPPL. 1), pp. e595-e598.
95. Cornicchi, E., Cinelli, S., Natali, F., Onori, G., Paciaroni, A.
Elastic neutron scattering study of proton dynamics in glycerol (2004) *Physica B: Condensed Matter*, 350 (1-3 SUPPL. 1), pp. e951-e954.
96. Cinelli, S., De Francesco, A., Onori, G., Paciaroni, A.
Thermal stability and internal dynamics of lysozyme as affected by hydration (2004) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 6 (13), pp. 3591-3595.
97. Bove, L.E., Catti, M., Paciaroni, A., Sacchetti, F.
Neutron scattering study of the dynamics of hydronium ion in (H₃O)Zr₂(PO₄)₃ Nasicon across the order - Disorder transition (2004) *Journal of Physical Chemistry B*, 108 (26), pp. 8910-8914.
98. De Francesco, A., Marconi, M., Cinelli, S., Onori, G., Paciaroni, A.

Picosecond Internal Dynamics of Lysozyme As Affected by Thermal Unfolding in Nonaqueous Environment
(2004) *Biophysical Journal*, 86 (1 1), pp. 480-487.

99. Freda, M., Onori, G., Paciaroni, A., Santucci, A.
Hydration-dependent internal dynamics of reverse micelles: A quasielastic neutron scattering study
(2003) *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 68 (2 1), art. no. 021406, pp. 021406/1-021406/7.
100. Paciaroni, A., Orecchini, A., Cinelli, S., Onori, G., Lechner, R.E., Pieper, J.
Protein dynamics on the picosecond timescale as affected by the environment: A quasielastic neutron scattering study
(2003) *Chemical Physics*, 292 (2-3), pp. 397-404.
101. Freda, M., Onori, G., Paciaroni, A., Santucci, A.
Hydration-dependent internal dynamics of reverse micelles: A quasielastic neutron scattering study
(2003) *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, 68 (2), p. 7.
102. Mondelli, C., Alianelli, L., Bée, M., Deriu, A., Natali, F., Paciaroni, A., Pfister, C.
Upgrade of the backscattering spectrometer IN13 at ILL
(2002) *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 74 (SUPPL.II), pp. S1505-S1507.
103. Freda, M., Onori, G., Paciaroni, A., Santucci, A.
Hydration and dynamics of aerosol OT reverse micelles
(2002) *Journal of Molecular Liquids*, 101 (1-3), pp. 55-68.
104. Freda, M., Onori, G., Paciaroni, A., Santucci, A.
Influence of hydration on dynamical properties of reverse micelles
(2002) *Journal of Non-Crystalline Solids*, 307-310, pp. 874-877.
105. Orecchini, A., Paciaroni, A., Bizzarri, A.R., Cannistraro, S.
Dynamics of different hydrogen classes in β -lactoglobulin: A quasielastic neutron scattering investigation
(2002) *Journal of Physical Chemistry B*, 106 (29), pp. 7348-7354.
106. Paciaroni, A., Cinelli, S., Onori, G.
Effect of the environment on the protein dynamical transition: A neutron scattering study
(2002) *Biophysical Journal*, 83 (2), pp. 1157-1164.
107. Orecchini, A., Paciaroni, A., Bizzarri, A.R., Cannistraro, S.

- Low-frequency vibrational anomalies in β -lactoglobulin: Contribution of different hydrogen classes revealed by inelastic neutron scattering
(2001) *Journal of Physical Chemistry B*, 105 (48), pp. 12150-12156.
108. Freda, M., Onori, G., Paciaroni, A., Santucci, A.
Elastic neutron scattering investigation of AOT- D2O-CCl4 systems in the reverse micellar phase
(2001) *Chemical Physics Letters*, 348 (3-4), pp. 311-316.
109. Bizzarri, A.R., Paciaroni, A., Arcangeli, C., Cannistraro, S.
Low-frequency vibrational modes in proteins: A neutron scattering investigation
(2001) *European Biophysics Journal*, 30 (6), pp. 443-449.
110. Paciaroni, A., Sacchetti, F., Cannistraro, S.
A Monte Carlo analysis of the elastic incoherent neutron scattering data in hydrated azurin
(2000) *Chemical Physics*, 261 (1-2), pp. 39-45.
111. Iannuzzi, M., Merlo, V., Paciaroni, A., Petrillo, C., Sacchetti, F.
A coincidence experiment of two coherent beams of thermal neutrons
(2000) *Foundations of Physics Letters*, 13 (1), pp. 1-9.
112. Bizzarri, A.R., Paciaroni, A., Cannistraro, S.
Glasslike dynamical behavior of the plastocyanin hydration water
(2000) *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, 62 (3 B), pp. 3991-3999.
113. Deriu, A., Paciaroni, A., Zaccai, J., Pfister, C.
First experimental results from the IN13-Collaborative Research Group (CRG) at the ILL
(2000) *Physica B: Condensed Matter*, 276-278, pp. 512-513.
114. Paciaroni, A., Bizzarri, A.R., Cannistraro, S.
Low frequency vibrational anomalies in hydrated copper azurin: A neutron scattering and MD simulation study
(2000) *Journal of Molecular Liquids*, 84 (1), pp. 3-16.
115. Paciaroni, A., Rita Bizzarri, A., Cannistraro, S.
Low frequency anomaly in the hydration water of Copper Azurin
(1999) *Physica B: Condensed Matter*, 269 (3-4), pp. 409-415.
116. Paciaroni, A., Stroppolo, M.E., Arcangeli, C., Bizzarri, A.R., Desideri, A., Cannistraro, S.

Incoherent neutron scattering of copper azurin: A comparison with molecular dynamics simulation results
(1999) European Biophysics Journal, 28 (6), pp. 447-456.

117. Paciaroni, A., Bizzarri, A.R., Cannistraro, S.
Neutron scattering evidence of a boson peak in protein hydration water
(1999) Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics, 60 (3), pp. R2476-R2479.
118. Paciaroni, A., Bizzarri, A.R., Cannistraro, S.
Molecular-dynamics simulation evidences of a boson peak in protein hydration water
(1998) Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics, 57 (6), pp. R6277-R6280.
119. Paciaroni, A., Petrillo, C., Sacchetti, F.
Temperature dependence of spin density in NiAl: Comparison with pure Ni
(1997) Journal de Physique II, 7 (7), pp. 865-875.
120. Paciaroni, A., Petrillo, C., Sacchetti, F.
Spin density distribution in Ni₉₅Mn₅
(1997) Solid State Communications, 103 (2), pp. 97-101.
121. Paciaroni, A., Petrillo, C., Sacchetti, F.
Antiphase domain and magnetic interactions in partially ordered Ni₃Mn
(1995) Physical Review B, 52 (5), pp. 3049-3052.

ATTIVITÀ DI TERZA MISSIONE

ATTIVITÀ DI TRASFERIMENTO SCIENTIFICO E TECNOLOGICO AD AZIENDE

- Progetto
- Azienda
 - Ruolo
- Data (da – a)
- Progetto
- Azienda
 - Ruolo

Effetto di estratti vegetali con proprietà antivirali sulla stabilità strutturale della proteina Spike del SARS-CoV-2

Convenzione con Bionatural Medicine, ABOCA group

Principal Investigator accademico

01/04/2021-

Effetto di antivirali progettati in-silico sulle proprietà della struttura quaternaria della proteina proteasi principale del SARS-CoV-2

Convenzione con Dompè Farmaceutici SPA

Principal Investigator accademico

• Data (da – a)

01/07/2021-

Perugia, 18/11/2022
(luogo e data)

Firma *Alfonso Forzani*

Cognome **PACIARONI**.....
 Nome **ALESSANDRO**.....
 nato il **29-05-1968**.....
 (atto n. **12** Pl. SA. **1968**.....)
 a **ACQUASPARTA (TR)**.....
 Cittadinanza **Italiana**.....
 Residenza **ACQUASPARTA (TR)**.....
 Via **CORSO UMBERTO PRIMO 13**.....
 Stato civile **STATO LIBERO**.....
 Professione.....
 CONNOTATI E CONTRASSEGNI SALIENTI
 Statura **183**.....
 Capelli **castani**.....
 Occhi **marroni**.....
 Segni particolari.....



Firma del titolare *Alessandro Paciaroni*.....
ACQUASPARTA li **28-09-2012**.....
 Imprints del **FUNZIONARIO DELEGATO**
 (Tiziana Ficola)
Tiziana Ficola

Scadenza : **29-05-2023**
 Diritti : **10,58**




AT 1216345



IPZS S.p.A. - OFFICINA S.V. ROMA

REPVBBLICA ITALIANA



COMUNE DI
 ACQUASPARTA

CARTA D'IDENTITA'
 N° AT 1216345
 DI
 PACIARONI ALESSANDRO