

Informazioni personali

Nome / Cognome

Indirizzo

Telefono

Fax

Email

Nazionalità

Data di nascita

Ciriaco Fulvio

via Card. F. Colasuonno 9, 70020 Modugno (BA)

0805442041

0805442129

fulvio.ciriaco@uniba.it

italiana

2-2-1969

Titoli ed esperienza professionale

1993

Riceve la laurea con lode in Chimica Fisica dall'Università di Pisa, con una tesi sulla simulazione di proprietà elettroniche e strutturali del silicio amorfo idrogenato e variamente drogato; contestualmente riceve il diploma di conseguimento degli studi della S.N.S. di Pisa.

settembre 1995-1998

aprile 1999-2001

dottorando in Scienze Chimiche presso il Dip. Di Chimica dell'Università di Bari.

titolare per il CNR Chimica dei Plasmi di una borsa di alta formazione biennale CEE, dal titolo "modellizzazione dei processi collisionali microscopici collegati ai problemi di rientro delle navicelle spaziali."

Dal 1 settembre 2001

ricercatore per la Facoltà di S.M.F.N. con afferenza al Dip. di Chimica, settore scientifico disciplinare C02X, Chimica Fisica.

Attività didattica

2012-oggi

Corso di Metodi di Calcolo per la Chimica, laurea triennale in Chimica

2010-oggi

Corso di Chimica Computazionale, corso di laurea magistrale in Scienze Chimiche.

2014

Corso di Chimica Computazionale per la scuola di dottorato in Scienze Chimiche

2004-2010

Corso di Chimica Fisica dello Stato Solido, corso di laurea specialistica in Scienze e Tecnologie Chimiche.

2004-2006

Corso di Chimica Quantistica e Computazionale, corso di laurea specialistica in Scienze e Tecnologie Chimiche.

2005-2006

Teoria ed Applicazioni del Laser.

2004-2006

Corso di Chimica Fisica delle Macromolecole Biologiche, corso di laurea specialistica in Scienze e Tecnologie Chimiche

2002-oggi

Assistenza di Laboratorio per il Laboratorio di Chimica Fisica II.

2001-2005

Corso di Chimica Fisica dello Stato Solido, corso di laurea breve in Scienza dei Materiali.

2001-2002

Laboratorio di Chimica Fisica I, corso di laurea in breve in Chimica

1996-1999

Esercitazioni per il corso di Chimica del corso di laurea in Ingegneria Meccanica, Politecnico di Bari

Attività di ricerca

...

studio modellistico dello scattering di He da superfici disordinate

...

studio dei meccanismi di fotodesorbimento di H₂ da Cu

...

studio dei meccanismi sottostanti alle proprietà di sensori di gas di sistemi a base di ossidi di stagno

...

studio della stabilità di stati a cariche separate in sistemi biologici.

...

produzione di H⁻¹ e H₂⁻¹ per collisione su W cesiato.

...

studio delle proprietà di località dell'interazione di configurazione ed implementazione e benchmarking delle sue applicazioni



,

- ... studio con metodi ab-initio dell'interazione fra superfici di oro e tiolati
- ... caratterizzazione spettroscopica della dinamica di sistemi biologici a cariche separate
- ... determinazione di costanti di binding fra aptameri di DNA e ligandi di interesse biologico e sanitario
- ... metodi AI per la determinazione dell'attività e della tossicità farmacologica



1. Trimethoxylated Halogenated Chalcones as Dual Inhibitors of MAO-B and BACE-1 for the Treatment of Neurodegenerative Disorders
2. Belviso, B.D.; Marin, F.; Fuertes, S.; Sicilia, V.; Rizzi, R.; Ciriaco, F.; Cappuccino, C.; Dooryhee, E.; Falcicchio, A.; Maini, L.; Altomare, A.; Caliendo, R. Structural Insights into the Vapochromic Behavior of Pt- and Pd-Based Compounds *Inorg. Chem.* **6349** 2021 60, 9 doi: 10.1021/acs.inorgchem.1c00081
3. Ciriaco, F.; De Leo, V.; Catucci, L.; Pascale, M.; Logrieco, A.F.; DeRosa, M.C.; De Girolamo, A. An In-Silico Pipeline for Rapid Screening of DNA Aptamers against Mycotoxins: The Case-Study of Fumonisin B1, Aflatoxin B1 and Ochratoxin A *POLYMERS* **2983** 2020 12, doi:10.3390/polym12122983
4. Alberga, D.; Gambacorta, N.; Trisciuzzi, D.; Ciriaco, F.; Amoroso, N.; Nicolotti, O. De Novo Drug Design of Targeted Chemical Libraries Based on Artificial Intelligence and Pair-Based Multiobjective Optimization. *JCIM* **4582** 2020 60,10 doi:10.1021/acs.jcim.0c00517
5. Andresini, M.; Spennacchio, M.; Romanazzi, G.; Ciriaco, F.; Clarkson, G.; Degennaro, L.; Luisi, R. Synthesis of Sulfonamides and Sulfonimide Esters by Transfer of Nitrogen to Sulfenamides. *Org. Lett.* **7129** 2020 22, doi:10.1021/acs.orglett.0c00000
6. Salado, M.; Andresini, M.; Huang, P.; Khan, M. T.; Ciriaco, F.; Kazim, S.; Ahmad, S. Interface Engineering by Thiazolium Iodide Passivation Towards Reduced Thermal Diffusion and Performance Improvement in Perovskite Solar Cells. *ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS* **30** 2020 14, ISSN:1616-301X doi:10.1002/adfm.201910561.
7. Montaruli, M.; Alberga, D.; Ciriaco, F.; Trisciuzzi, D.; Tondo, A. R.; Mangiatordi, G. F.; Nicolotti. Accelerating drug discovery by early protein drug target prediction based on a multi-fingerprint similarity search *MOLECULES* **24** (2019) 2233 ISSN:1420-3049 doi:10.3390/molecules24122233
8. F. Milano, F. Ciriaco, M. Trotta, D. Chirizzi, V. De Leo, A. Agostiano, L. Valli, L. Giotta, M. R. Guascito. Design and modelling of a photo-electrochemical transduction system based on solubilized photosynthetic reaction centres. *ELECTROCHIMICA ACTA*, **293** (2018) 105-115, ISSN: 0013-4686, doi: 10.1016/j.electacta.2018.09.198
9. Cataldo, R., Ciriaco, F., Alfinito, E. A validation strategy for in silico generated aptamers. *COMPUTATIONAL BIOLOGY AND CHEMISTRY*, ISSN: 1476-9271, doi: 10.1016/j.compbiolchem.2018.09.014
10. Andresini, M., De Angelis, S., Uricchio, A., Visaggio, A., Romanazzi, G., Ciriaco, F., Corriero, N., Degennaro, L., Luisi, R. Azetidine-Borane Complexes: Synthesis, Reactivity and Stereoselective Functionalization. *JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*, vol. 83, p. 10221-10230-10230, ISSN: 0022-3263, doi: 10.1021/acs.joc.8b01441
11. Milano, F., Tangorra, R., Agostiano, A., Giotta, L., De Leo, V., Ciriaco, F., Trotta, M. Modulating the lifetime of the charge-separated state in photosynthetic reaction center by out-of-protein electrostatics. *MRS ADVANCES*, p. 1-11, ISSN: 2059-8521, doi: 10.1557/adv.2018.242
12. Altomare A., Ciriaco F., Cuocci C., Falcicchio A., Fanelli F. Combined powder X-ray diffraction data and quantum-chemical calculations in EXPO2014. *POWDER DIFFRACTION*, p. 1-6, ISSN: 0885-7156, doi: 10.1017/S088571561700015X
13. F. Ciriaco, R. R. Tangorra, A. Antonucci, L. Giotta, A. Agostiano, M. Trotta, F. Milano Semiquinone oscillations as tool for investigating the ubiquinone binding to photosynthetic reaction centers. *Eur Biophys J.* **44** (2015) 183-192
14. F. Mavelli, M. Trotta, F. Ciriaco, A. Agostiano, L. Giotta, F. Italiano, F. Milano The binding of quinone to the photosynthetic reaction centers: kinetics and thermodynamics of reactions occurring at the Q_B site in zwitterionic and anionic liposomes *Eur Biophys J.*, **43** (2014) 301–315
15. F. Ciriaco, F. Mavelli, L. Cassidei, Benchmark calculations of density functionals for organothiol adsorption on gold surfaces. *Comp. and Theoretical Chem.*, **1009** (2013) 60-69.
16. L. Cassidei, F. Ciriaco, Determination of Ag submonolayer structures on Pt(111) from simulation and data of He scattering experiments. *Chem. Phys.*, **380** (2011) 61-66
17. S. Laricchia, F. Ciriaco, L. Cassidei, F. Mavelli, DFT study of 1,3-benzenedimethanethiol adsorption on Au(111). , *Sensor Letters*, **8** (2010) 1-7
18. F. Ciriaco, L. Cassidei, G. Petrella "First principle study of processes modifying the conductivity of substoichiometric SnO2 based materials upon adsorption of CO from atmosphere.", *Chem. Phys.* **303** (2004) 55-61.
19. G. Petrella, L. Cassidei, F. Ciriaco "The interpretation of helium scattering in the thermal energy regime to obtain information about surface structure and interaction data for adsorbate covered metallic surfaces.", *Recent Res. Devel. Chem. Physics* **3** (2002) 57-83.



20. G. Petrella, L. Cassidei, F. Ciriaco, "Light particle scattering diffraction from surfaces in the sudden approximation", *Comp. Phys. Comm.* **138** (2001) 128-135.
21. G. Petrella, L. Cassidei, F. Ciriaco, "Ag submonolayer structures on Pt(111) in conditions of thermodynamic equilibrium from simulation of He scattering experiments.", *Chem. Phys.* **263** (2001) 95-100.
22. G. Petrella, L. Cassidei, F. Ciriaco, "Order and disorder signatures in the specular scattering intensity of He particles from adsorbate covered Pt surfaces.", *Chem. Phys.* **256** (2000) 259-264.
23. G. Petrella, L. Cassidei, F. Ciriaco, "He scattering from disordered surfaces: specular intensity, cross-section and surface structure.", *Chem. Phys. Lett.* **291** (1998) 562-566.
24. G. Petrella, L. Cassidei, F. Ciriaco, "The correlation between the statistical properties of surface defect distribution and the specular intensity obtained from low energy He scattering technique", *Chem. Phys.* **231** (1998) 31-38.
25. G. Petrella, L. Cassidei, F. Ciriaco, "Disordered surfaces: a smoothed He-target scattering potential for metal atoms adsorbed on metal surfaces", *Chem. Phys.* **216** (1997) 391-399.

* Altre pubblicazioni

1. K. Ruiz-Mirazo, G. Piedrafita, F. Ciriaco, F. Mavelli Stochastic Simulations of Mixed-Lipid Compartments: From self-assembling vesicles to self-producing protocells., in *ARABNIA H.R.. Software Tools and Algorithms for Biological Systems*. 2011 ISBN: 978-1-4419-7045-9
2. F. Mavelli, F. Ciriaco, L. Cassidei, U.T. Lamanna Stochastic Simulations of Proto-Cells: Lipid Vesicles Dynamics., in *Advanced Topics in Cell Model Systems.: A. Macagnano, A. Ramundo Orlando, F. Allen Farrelly, A. Petri, M. Girasole*. Haupage, NY: Nova Science Publishers, Inc. 2009.
3. G. Petrella, L. Cassidei, F. Ciriaco The interpretation of helium scattering in the thermal energy regime to obtain information about surface structure and interaction data for adsorbate covered metallic surfaces., in *Recent Research Developments in Chemical Physics*. vol. 3, p. 57-84 2002, TRIVANDRUM:transworld research network: S.G. Pandalai, ISBN: 81-7895-066-9

Bari 2021-09-16

