

## CURRICULUM VITAE

### Dott. Roberta Galeazzi

#### INFORMAZIONI PERSONALI

Nome **ROBERTA GALEAZZI**  
E-mail **r.galeazzi@univpm.it**  
Nazionalità Italiana

#### ESPERIENZA LAVORATIVA

- Date (da – a) **10/2001 – Oggi**  
• Nome e indirizzo del datore di lavoro Università Politecnica delle Marche  
• Tipo di azienda o settore Università  
• Tipo di impiego Ricercatore a tempo indeterminato (RU) CHIM/06
- Date (da – a) **02/1996 – 09/2001**  
• Nome e indirizzo del datore di lavoro Università Politecnica delle Marche  
• Tipo di azienda o settore Università  
• Tipo di impiego Tecnico Laureato Chimica
- Date (da – a) **01/1995 – 07/1995**  
• Nome e indirizzo del datore di lavoro CHEMIOFARM  
• Tipo di azienda o settore Azienda Chimica farmaceutica  
• Tipo di impiego Borsa di studio per lo studio di vie alternative di sintesi di farmaci già sotto brevetto
- Date (da – a) **05/1994 – 12/1994 E 05/1993 – 12/1993**  
• Nome e indirizzo del datore di lavoro Università Politecnica delle Marche  
• Tipo di azienda o settore Università  
• Tipo di impiego Contratti tempo determinato ai sensi dell'art.26 del D.P.R.382/1980 stipulati con l'Università degli Studi di Ancona per prestazioni professionali relative all'uso di attrezzature scientifico-didattiche di particolare complessità nell'ambito dell'insegnamento di Laboratorio di Chimica della Facoltà di Scienze.

#### ISTRUZIONE E FORMAZIONE

- Date (da – a) Marzo 1993  
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione Abilitazione alla professione di chimico
- Date (da – a) 1987 – 1992  
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione Università degli Studi di Bologna  
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio Chimica, votazione 110/110 e lode, tesi di laurea sulle proprietà spettroscopiche e reattività dei fullereni (Prof. G. Orlandi)  
• Qualifica conseguita Laurea

- Date (da – a)
- Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione
- Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio
- Qualifica conseguita

1982 – 1987  
 Liceo Scientifico “Galileo Galilei” - Ancona  
 Maturità Scientifica, 60/60  
 Diploma superiore- Maturità

## CAPACITÀ E COMPETENZE PERSONALI

MADRELINGUA

ITALIANO

ALTRE LINGUE

- Capacità di lettura
- Capacità di scrittura
- Capacità di espressione orale

**INGLESE**  
 ECCELLENTE  
 OTTIMA  
 OTTIMA

CODICE SCOPUS E ORCID

Author ID: 7005671848  
<http://orcid.org/0000-0003-1792-654X>

Autore di 87 lavori pubblicati su Riviste Internazionali/Nazionali e 60 in Atti di Convegni Internazionali/Nazionali.

*H index globale 20*

## CAPACITÀ E COMPETENZE TECNICHE

Dall'1.10.2001 è Ricercatore di ruolo presso il Dipartimento di Scienze della Vita e dell'Ambiente (DISVA) (ex Facoltà di Scienze) dell'Università Politecnica delle Marche, Settore Scientifico Disciplinare CHIM/06 “Chimica Organica”.

### **ATTIVITÀ DIDATTICA**

In aggiunta all'attività didattica istituzionale di ricercatore, per attribuzione di incarico (prof. Aggregato ai sensi art.1 comma 11 L.230/2005), la candidata dall'anno 2001 ad oggi è titolare di corsi della Laurea triennale in Biologia e della Laurea Magistrale in Biologia Molecolare e Applicata.

#### **Corsi attuali (a.a.2017/2018)**

-CHIMICA I (A-L) (9 CFU) LT in Biologia  
 -MODELING DI SISTEMI BIOLOGICI 5 CFU LM in Biologia molecolare e applicata

#### **Corsi dall'a.a. 2001/2002 ad oggi:**

Titolare di supplenza per corsi nell'ambito del settore scientifico disciplinare CHIM/06-CHIM/08 per la Facoltà di Scienze dell'Università Politecnica delle Marche:

- CHIMICA ORGANICA APPLICATA per la laurea triennale in Scienze Biologiche;  
 -MODELLISTICA E DESIGN BIOMOLECOLARE (CHIM06/CHIM08) per la laurea specialistica di Biologia Industriale e magistrale in Biologia Applicata.

-STRUTTURA E CHIMICA DEI RECETTORI (ex CHIMICA DEI RECETTORI) (CHIM/08) per la laurea specialistica di Biologia Industriale e magistrale in Biologia Applicata.

**Docenza di Dottorato:**

Sono stata e sono tuttora titolare di un corso per la Scuola di dottorato della stessa Facoltà (ora DISVA) (27 ore fino a.a. 2015-2016, 16 ore ad oggi):

*-METODI COMPUTAZIONALI APPLICATI A SISTEMI DI INTERESSE BIOLOGICO per gli studenti della Scuola di dottorato di Scienze (curricula Scienze Biomolecolari) dall'a.a. 2001-2002 ad oggi.*

**Membro collegio docenti dottorato:**

Dal 2006 al 2013 è stata **componente del collegio di dottorato** per la Scuola di Dottorato in Scienze Biomolecolari applicate (dal 2014 divenuto curriculum della Scuola di dottorato di Scienze).

**ATTIVITÀ DI RICERCA**

La mia attività di ricerca ha interessato negli anni diversi ambiti della Chimica Bioorganica e Farmaceutica.

In particolare nell'ultimo decennio, essa si è focalizzata sull'applicazione di metodiche della chimica computazionale e modellistica molecolare quali dinamica molecolare e docking per l'individuazione di nuovi composti potenziali farmaci (sia sintetici che naturali) e per la razionalizzazione delle basi molecolari di processi biologici ed epigenetici alla base di importanti patologie.

Più in particolare mi sono occupata di:

- Identificazione e progettazione di potenziali inibitori delle pompe di efflusso batteriche più precisamente di Highthroughput Virtual Screening di librerie di composti naturali e rational drug design di inibitori di pompe di efflusso batteriche (batteri gram negativi) di *Pseudomonas aeruginosa* e *Escherichia coli* (**Progetto Strategico di Ateneo 2016-2018**).
- Studio del meccanismo di attivazione dei recettori della serotonina (in particolare 5-HT<sub>2c</sub>) e di farmaci agonisti ed antagonisti, finalizzato a porre le basi razionali per la progettazione e sintesi di molecole attive con alta selettività.
- Studio di inibitori e del meccanismo catalitico dell'Aromatasi (enzima coinvolto nel pathway dell'estradiolo e pertanto bersaglio per farmaci antitumorali-tumore al seno)
- Messa a punto di nuovi sistemi liposomiali per il drug delivery. In particolare mi sono occupata sulla previsione mediante dinamica molecolare della stabilità di nuovi liposomi a composizione mista contenenti nuove tipologie di lipidi sintetici (progetti PRACE, IS CRA )

Attualmente, ho la responsabilità di ricerca del Laboratorio di Modellistica Molecolare del DISVA e utilizzo correntemente ai fini di tali ricerche una vasta serie di programmi computazionali quali AMBER, Gaussian09, GROMACS, Autodock, Chimera, VMD/NAMD.

## RESPONSABILITÀ PROGETTUALI

Sono (/sono stata) responsabile scientifico di progetto o di unità operativa per diversi progetti di ricerca. In particolare:

- **Principal Investigator e Responsabile scientifico del progetto Strategico di Ateneo 2016-2018** (assegnazione dei finanziamenti in peer review), dal titolo "Pseudomonas aeruginosa biofilm persistent infections: improved detection of non-culturable forms and identification of efflux systems inhibitors (EPIs) from natural sources able to counteract biofilm development antibiotic efflux using a combined *in silico*/*in vitro* screening." (finanziamento ricevuto: 43.000 euro, durata 24 mesi, 2016-2018). Tale progetto è incentrato sulla progettazione e identificazione di potenziali inibitori delle pompe di efflusso batteriche della *P. aeruginosa* partendo da fonti di leads naturali. In particolare, si inserisce nelle strategie farmaceutiche di superamento delle resistenze di batteri gram negativi, in patologie gravi come la fibrosi cistica e nelle infezioni nosocomiali. Le ricerche comportano una collaborazione stretta tra lo screening *in silico* e la modifica sintetica dei leads naturali e il test microbiologico *in vitro* (gruppo della Prof.ssa Francesca Biavasco dell'Univpm, ordinario di microbiologia). (link:[http://www.univpm.it/Entra/Engine/RAServeFile.php/f/Finanziati\\_tipologia\\_4\\_tipologia\\_b.pdf](http://www.univpm.it/Entra/Engine/RAServeFile.php/f/Finanziati_tipologia_4_tipologia_b.pdf)).
- **Responsabile Scientifico di un Progetto Eureka (peer review) finalizzato al cofinanziamento di una Borsa di dottorato di Ricerca in "SCIENZE DELLA VITA E DELL'AMBIENTE" XV ciclo, nuova serie NELL'AMBITO DEL PROGETTO "EUREKA – BORSE DI DOTTORATO DI RICERCA PER L'INNOVAZIONE" DELLA REGIONE MARCHE (progetto in compartecipazione con la ditta Sooft Italia s.pa. finalizzato al "Design razionale e sintesi di lipidi funzionalizzati ad attività antiossidante e di scavenging di radicali liberi come componenti di lacrime artificiali innovative"; approvato Decreto del Dirigente della P.F. Istruzione, Formazione integrata, Diritto allo studio e Controlli di primo livello della Regione Marche n. 203/IFD del 23.08.2013).**
- Responsabile scientifico di Progetti "Computer facility Projects" finanziati in **ISCRA\_CINECA High Performance Computing** (granted in peer review):
  - CINECA-ISCRA C 2010-2011: "*DFT investigation of SN2 ' reaction mechanism mediated by chiral tertiary bases*"; code: HP10C8FDT8 Total core hours: **10000 h**; SP6 (PI: R.Galeazzi).
  - CINECA-ISCRA C 2011-2012: "*Combined Docking and Molecular Dynamics of agonists and antagonists 5-HT2C G-coupled Receptor*"; code: **HP10C7SS74** Total core hours: **30000 h**; SP6/PLX /FERMI (PI: R.Galeazzi).
  - CINECA-ISCRA C 2012-2013: "*In silico investigation of the effect of amino acids mutation in ligand binding modes of serotonin agonists and antagonists in complex with 5-HT2C G-coupled Receptor in its biological environment by full atom molecular dynamics.*"; code: **HP10CC8CNW** Total core hours: **250000 h**; FERMI /PLX (PI: R.Galeazzi).
  - CINECA-ISCRA C 2013-2014: "*Design of new functionalized lipids with*

- antioxydant activity* ; code: **HP10CH0P7F** Total core hours: **50000 h**; EURORA (PI: R.Galeazzi).
- CINECA-ISCRA C 2014-2015: “*All atoms MD simulations of mixed DOPC/DOPE based membrane bilayers for Neutral Liposomes (NLs) as synthetic vectors in Gene therapy*” **HP10C4DI1B** Total core hours: **70000 h**; Galielo/EURORA (PI: R.Galeazzi).
  - CINECA-ISCRA C 2015-2016:” *Molecular dynamics of liposomal nanovectors with antioxidant activity: a structure-activity study*”, **HP10C6BRNO** Total core hours: **60000 h**; Galielo (PI: R.Galeazzi).
  - CINECA-ISCRA C 2016-2017: “*Influence of lipid matrix in lipid bilayer stabilization for liposomal nanovectors with antioxidant activity: a Molecular Dynamics study*” .**HP10C6GRB6** Total core hours: **90000 h**; Galileo (PI: R.Galeazzi).
  - CINECA-ISCRA C 2017-2018: “*Influence of lipid matrix composition in liposomal encapsulation and stabilization of morelloflavone and epigallocatechingallate: A molecular dynamics investigation*”, **HP10CXYY**, Total core hours: **20000 h**; MARCONI BDW (PI: R.Galeazzi).

- **Responsabile Scientifico del Progetto Europeo in Peer Review PRACE:**

-EUROPEAN FACILITY PROJECTS: **PRACE DECI-9 HPC grant: 2012-2013** project name DOPE;

Link <http://www.prace-ri.eu/dec9-call/#BioSciences>)

DOPE (NAME)

Project Title: Molecular Dynamics simulations of mixed DOPC/DOPE based membrane bilayer; Project Leader: Dr Roberta Galeazzi, Università Politecnica delle Marche, Ancona, Italy Resource Awarded: 3 000 000 core hours on CINECA – PLX

I risultati sono stati pubblicati su un numero special “Women in HPC” in cui sono state messe in luce le principali tematiche di frontiera nella ricerca

- **Responsabile scientifico e coordinatore dei progetti di ricerca di Ateneo:**

1. Responsabile scientifico e coordinatore del progetto di ricerca finanziato con fondi di ricerca di Ateneo UNIVPM (2011) per il progetto n.6226: “Docking Combinato nel doppio strato lipidico di agonisti ed antagonisti del recettore serotoninico 5-HT<sub>2c</sub>” dal 01-01-2011 al 31-12-2011
2. Responsabile scientifico e coordinatore del progetto di ricerca finanziato con fondi di ricerca di Ateneo UNIVPM (2012) per il progetto n.7094: “Studio del meccanismo di Oligomerizzazione dei recettori serotoninici 5-HT-GPCRs in membrana mediante Dinamica Molecolare Coarse-Grained e Fine Grained. Dinamica Molecolare di membrane lipidiche miste a base DOPC/DOPE” dal 01-01-2012 al 31-12-2012
3. Responsabile scientifico e coordinatore del progetto di ricerca finanziato con fondi di ricerca di Ateneo UNIVPM (2013) per il progetto n.185: “Simulazioni di dinamica molecolare di proteine in

membrana.”  
dal 01-01-2013 al 31-12-2013

4. Responsabile scientifico e coordinatore del progetto di ricerca finanziato con fondi di ricerca di Ateneo UNIVPM (2014) per il progetto n.83: “Studio del meccanismo di Oligomerizzazione dei recettori serotoninici 5-HT-GPCRs in membrana mediante Dinamica Molecolare Coarse-Grained e Fine Grained.” dal 01-01-2014 al 31-12-2014
5. Responsabile scientifico e coordinatore del progetto di ricerca finanziato con fondi di ricerca di Ateneo UNIVPM (2015) per il progetto n.72: “Design *in silico* di nanovettori liposomiali ad attività antiossidante contenenti lipidi derivati da prodotti naturali.” dal 01-01-2015 al 31-12-2015
6. Responsabile scientifico e coordinatore del progetto di ricerca finanziato con fondi di ricerca di Ateneo UNIVPM (2016) per il progetto n.64: “revisione *in silico* della struttura completa del recettore HER2 e della sua variante di splicing d16, overespressi in alcune forme di tumore mammario” dal 01-01-2016 al 31-12-2016
7. Responsabile scientifico e coordinatore del progetto di ricerca finanziato con fondi di ricerca di Ateneo UNIVPM (2017) per il progetto n.128: “Affinità di binding di antagonisti e agonisti inversi per i recettori 5-HT2a e 5HT-2c polimorfici.” dal 01-01-2017 al 31-12-2017

#### ATTIVITÀ EDITORIALI E DI REFERAGGIO

-Ho svolto attività di referaggio per le seguenti riviste (ambito CHIM08, CHIM06 e Chemistry multidisciplinary):

- Medicinal Chemistry Research, Current Computer Aided Drug Design (CCADD), Molecules, Expert Opinion on Drug Discovery, Journal of Computational Chemistry, Journal of Molecular Modeling, ACS Journal of Chemical Theory and Computation (JCTC), Molecules, Chirality, Entropy Tetrahedron, Letters in Drug Design and Discovery, International Molecular Structure, Expert opinion in Drug Discovery, Anticancer Agent in Medicinal Chemistry, Journal of Molecular Structure.

-Sono Membro dell' **Editorial Board** di: **Chemical Informatics** (int. Med. Publishing) <http://cheminformatics.imedpub.com/editors.php>

- **Guest Editor** per Molecules

Special Issue in Biomolecular Simulation Marzo 2017:

[http://www.mdpi.com/journal/molecules/special\\_issues/simulations](http://www.mdpi.com/journal/molecules/special_issues/simulations)

E special issue in Symmetry in Molecular dynamics –april 2018:

[http://www.mdpi.com/journal/symmetry/special\\_issues/Symmetry\\_Molecular\\_Dynamics](http://www.mdpi.com/journal/symmetry/special_issues/Symmetry_Molecular_Dynamics)

- **Referee** per istituzioni nazionali ed internazionali quali:

- **MIUR-CINECA** progetti nazionali FIRB 2012 e FIRB2013, e PRIN 2012, PRIN 2015.
- Scientific Referee nella **VQR\_2004-2010** (ambito GEV 03 and GEV 05) e **VQR\_2011-2014** (ambito GEV03)
- **Scientific Advisor and Referee** for l'ISCRA (Cineca HPC High Performance scientific Computing) (dal 2011 ad oggi) and PRACE (dal 2014 ad oggi)
- **Referee** Unimore progetti FAR2015