

# Curriculum di Claudia Bonaccini

## Percorso formativo

### da luglio 2006

Assegno di ricerca presso il Laboratorio di Molecular Modeling & QSAR del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università degli Studi di Firenze, sotto la supervisione della Prof. Paola Gratteri.

### marzo - giugno 2006

Contratto di collaborazione presso il Laboratorio di Molecular Modeling & QSAR del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università degli Studi di Firenze, sotto la supervisione della Prof. Paola Gratteri.

### 2005

Borsa di studio post-doc assegnata dall'Istituto Pasteur "Fondazione Cenci Bolognetti", presso il Biocomputing Group del Dipartimento di Scienze Biochimiche "Rossi-Fanelli", Università di Roma "La Sapienza", sotto la supervisione della Prof. Anna Tramontano.

### 2004 ~ 2005

Contratto di ricerca presso il Biocomputing Group del Dipartimento di Scienze Biochimiche "Rossi-Fanelli", Università di Roma "La Sapienza", sotto la supervisione della Prof. Anna Tramontano.

### 2001 ~ 2004

Dottorato di Ricerca in Chimica e Tecnologia del Farmaco (Molecular Modelling) svolto presso il gruppo di Molecular Modeling e QSAR del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università di Firenze, sotto la supervisione del Prof. Fabrizio Melani.

### 2001

Esame di abilitazione alla professione di farmacista

### 2000

Laurea in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche presso l'Università di Firenze

## Stages

2002

Stage formativo nell'ambito dell'attività di dottorato, presso il Laboratorio di Chemometria dell'Università di Perugia, sotto la supervisione del Prof. Gabriele Cruciani.

2000

Stage formativo nell'ambito della preparazione all'esame di abilitazione svolto presso Ely-Lilly Italia, Divisione Controllo di Qualità, sotto la supervisione del Dr. Michele Mazzanti.

1999

Stage formativo nell'ambito del programma di scambio Socrates-Erasmus svolto nel Laboratorio di chimica organica, Facoltà di Farmacia, dell'Università Paris V , sotto la supervisione del Prof. Hervè Galons

## Corsi e scuole frequentati

- Fifth European Workshop in Drug Design - May 29 - June 05, 2005 - Certosa di Pontignano, Siena (I)
- ESMEC - European School of Medicinal Chemistry - XXIV Advanced course of Medicinal Chemistry and "E. Duranti" National Seminar for PhD Students – July 4-8, 2004, Campus Scientifico Sogesta, Urbino (I).
- Genome-Based Drug Discovery International Conference – 22-27 marzo 2004, Firenze (I).
- XXIII Corso Avanzato in Chimica Farmaceutica e Seminario Nazionale per dottorandi "E. Duranti"– 30 giugno-4 luglio 2003, Campus Scientifico Sogesta, Urbino (I).
- International Workshop: New Approaches in Drug Design & Discovery – 24-27 marzo 2003, Marburg (D)
- ESF Training Course on Molecular Interaction: New Frontiers for Computational Methods – 20-25 luglio 2002, Verona (I).

- XXII Corso Avanzato in Chimica Farmaceutica e Seminario Nazionale per dottorandi “E. Duranti”– 1-5 luglio 2002, Campus Scientifico Sogesta, Urbino (I).
- 33<sup>rd</sup> crystallographic course at the E. Majorana Centre “From genes to Drugs via Crystallography” – 23 maggio – 2 giugno 2002, Erice (I).
- 3<sup>rd</sup> Bologna Winter School on Biotechnology – 3-9 febbraio 2002, Bologna (I).
- WHAT IF User Course (protein structure analysis program) – 8-12 ottobre 2001 – Università di Nijmegen (NL).
- 1a Scuola Nazionale di chimica dei sistemi biologici. – 16-21 luglio 2001, Verona (I).
- XXI Advanced course of Medicinal Chemistry and “E. Duranti” National Seminar for PhD Students – 1-5 luglio 2001, Campus Scientifico Sogesta, Urbino (I).
- 3<sup>rd</sup> European Workshop in Drug Design – 17-24 giugno 2001, Siena (I).

## Congressi

- ACS-EFMC “Frontiers in CNS and Oncology Medicinal Chemistry” - 7-9 ottobre 2007, Siena, Italy.
- XXII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana- 10-15 settembre 2006, Firenze, Italy.
- XVIIth International Symposium on Medicinal Chemistry- 1-5 settembre 2002, Barcellona, Spain.
- First Magna Graecia Medicinal Chemistry Workshop on New Perspective in Drug Research –10-13 giugno 2001, Villaggio Guglielmo, Copanello (Catanzaro, Italy).

## Publicazioni

1. J. Sgrignani, C. Bonaccini, G. Grazioso, M. Chioccioli, A. Cavalli, P. Gratteri: *Insights into docking and scoring neuronal  $\alpha 4\beta 2$  nicotinic receptor agonists using Molecular Dynamics simulations and QM/MM calculations.* **J. Comp. Chem.** 30(15), 2443-54 (2009). DOI:[10.1002/jcc.21251](https://doi.org/10.1002/jcc.21251)
2. F. Cardona, C. Parmeggiani, E. Faggi, C. Bonaccini, P. Gratteri, L. Sim, T. M. Gloster, S. Roberts, G. J. Davies, D. R. Rose, A. Goti: *Total Synthesis of Casuarine and its 6-O- $\alpha$ -Glucoside: Complementary Inhibition towards Glucoside Hydrolases of Families GH31 and GH37.* **Chemistry Eur. J.** 15(7), 1627-36 (2009). DOI:[10.1002/chem.200801578](https://doi.org/10.1002/chem.200801578)
3. C. Bazzicalupi, A. Bencini, C. Bonaccini, C. Giorgi, P. Gratteri, S. Moro, M. Palumbo, A. Simionato, J. Sgrignani, C. Sissi, B. Valtancoli: *Tuning the Activity of Zn(II) Complexes in DNA Cleavage: Clues for Design of New Efficient Metallo-Hydrolases.* **Inorg. Chem.**, 47(12), 5473-84 (2008). DOI:[10.1021/ic800085n](https://doi.org/10.1021/ic800085n)
4. M. N. Romanelli, P. Gratteri, L. Guandalini, E. Martini, C. Bonaccini, F. Gualtieri: *Central Nicotinic Receptors: Structure, Function, Ligands, and Therapeutic Potential.* **ChemMedChem**, 2(6), 746-67 (2007). DOI:[10.1002/cmdc.200600207](https://doi.org/10.1002/cmdc.200600207)
5. C. Alcaro, F. Nuti, G. Bonechi, F. Barbetti, A. Carotenuto, C. Bonaccini, P. Gratteri, A. Tramontano, F. Lolli, M. Chelli, E. Novellino, P. Rovero, A. Papini. *New generation of families of antigenic probes for detection of multiple sclerosis biomarkers.* **Biopolymers**, 88, 609 (2007).
6. G. Bianchettin, C. Bonaccini, R. Oliva, A. Tramontano, S. Cividini, M. Casato, G. Merlini, E. Silini, M. U. Mondelli: *Analysis of hepatitis C virus hypervariable region 1 sequence in cryoglobulinaemic patients and associated controls.* **J. Virol.**, 81(9), 4564-71(2007). DOI:[10.1128/JVI.02104-06](https://doi.org/10.1128/JVI.02104-06)
7. R. Ragno, S. Simeoni, S. Castellana, C. Vicidomini, A. Mai, A. Caroli, A. Tramontano, C. Bonaccini, P. Trojer, I. Bauer, G. Brosch, G. Sbardella: *Small Molecule Inhibitors of Histone Arginine Methyltransferases: Homology Modeling, Molecular Docking, Binding Mode Analysis, and Biological Evaluations.* **J. Med. Chem.**, 50(6), 1241-53 (2007). DOI:[10.1021/jm061213n](https://doi.org/10.1021/jm061213n)
8. S. Selleri, P. Gratteri, C. Costagli, C. Bonaccini, A. Costanzo, F. Melani, G. Guerrini, G. Ciciani, B. Costa, F. Spinetti, C. Martini, F. Bruni: *Insight into 2-phenylpyrazolo[1,5-a]pyrimidin-3-yl acetamides as peripheral benzodiazepine receptor ligands: synthesis, biological evaluation and 3D-QSAR investigation.* **Bioorg. Med. Chem.**, 13(16), 4821-34 (2005). DOI:[10.1016/j.bmc.2005.05.015](https://doi.org/10.1016/j.bmc.2005.05.015)

9. P. Gratteri, C. Bonaccini, F. Melani: *Searching for a reliable orientation of ligands in their binding site: comparison between a structure-based (Glide) and a ligand-based (FIGO) approach in the case study of PDE4 inhibitors.* *J. Med. Chem.* 48(5), 1657-65(2005). DOI:[10.1021/jm049289b](https://doi.org/10.1021/jm049289b)
10. P. Gratteri, M. N. Romanelli, G. Cruciani, C. Bonaccini, F. Melani: *GRIND-derived pharmacophore model for a series of  $\alpha$ -tropanyl derivative ligands of the sigma-2 receptor.* *J. Comput.-Aided Mol. Design*, 18(5), 361-74 (2004). DOI:[10.1023/B:JCAM.0000047815.22931.3b](https://doi.org/10.1023/B:JCAM.0000047815.22931.3b)
11. F. Melani, P. Gratteri, M. Adamo, C. Bonaccini: *Field Interaction and Geometrical Overlap (FIGO): a new Simplex/experimental design-based computational procedure for superposing small ligand molecules.* *J. Med. Chem.* 46(8), 1359-71 (2003). DOI:[10.1021/jm0210616](https://doi.org/10.1021/jm0210616)
12. F. Melani, P. Mura, M. Adamo, F. Maestrelli, P. Gratteri, C. Bonaccini: *New docking CFF91 parameters specific for cyclodextrin inclusion complexes.* *Chem. Phys. Lett.* 370(1-2), 280-92 (2003). DOI:[10.1016/S0009-2614\(03\)00126-X](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(03)00126-X)
13. S. Selleri, F. Bruni, C. Costagli, A. Costanzo, G. Guerrini, G. Ciciani, P. Gratteri, C. Bonaccini, P. Malmberg Aiello, F. Desnard, S. Renard, B. Costa, C. Martini: *Synthesis and BzR Affinity of Pyrazolo[1,5-a]pyrimidine Derivatives. Part 3: New 6-(Thienyl) Series as  $\alpha 1$  selective ligands.* *J. Med. Chem.* 46(2), 310-3 (2003). DOI:[10.1021/jm020999w](https://doi.org/10.1021/jm020999w)
14. F. Melani, P. Gratteri, M. Adamo, C. Bonaccini: *FILo (Field Interaction Ligand Optimization): a simplex strategy for searching the optimal ligand interaction field in drug design.* *J. Comput.-Aided Mol. Design* 15(1), 57-66 (2001). DOI:[10.1023/A:1011178027463](https://doi.org/10.1023/A:1011178027463)

## Poster

1. J. Sgrignani, S. Raugei, C. Bonaccini, M. Chioccioli, P. Carloni, P. Gratteri: *Free energy calculation to evaluate glycosidase inhibitors.* **Winter School on Physical Organic Chemistry (WiSPOC)** - Bressanone (Italia), 27 gennaio - 1 febbraio 2008 (Comunicazione Poster P-29, p.376 Book of Abstract)
2. C. Bonaccini, J. Sgrignani, C. Guarino, S. Selleri, P. Gratteri: *Induced-fit docking investigation on  $\alpha_n$ -subtype selective binding mode for bicyclic GABA<sub>A</sub>-Bz receptor ligands bearing pyrazole nucleus.* **ACS-EFMC "Frontiers**

in **CNS and Oncology Medicinal Chemistry**", Siena (Italia), 7-9 ottobre 2007 (Comunicazione Poster P76, p.49 Book of Abstract)

3. J. Sgrignani, **C. Bonaccini**, M. Chioccioli, F. Cardona, A. Goti, P. Gratteri: *Molecular Modeling investigations of ligands acting as glucoamylase II inhibitors*. Winter School on Physical Organic Chemistry (WiSPOC) - Bressanone (Italia), 11-18 gennaio 2007. (Comunicazione Poster).
4. J. Sgrignani, **C. Bonaccini**, F. Melani, D. Catarzi, P. Gratteri: *Docking and 3D-QSAR analysis on i-GluR2 receptor*. XXII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana. Firenze (Italia), 10-15 settembre 2006. (Comunicazione Poster FAR-P-069, p. 188 Libro degli Atti).
5. S. Castellano, R. Ragno, S. Simeoni, C. Vicidomini, A. Mai, A. Tramontano, **C. Bonaccini**, G. Brosch, G. Sbardella: *Small Molecule Inhibitors of Histone Arginine Methyltransferases: Homology Modeling, Molecular Docking, Binding Mode Analysis and Biological Evaluations*. XXII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Firenze (Italia), 10-15 settembre 2006 (Comunicazione Poster FAR-P-019, p.175 Libro degli Atti).
6. M. C. Alcaro, B. Mulinacci, G. Bonechi, F. Barbetti, I. Paolini, E. Peroni, F. Nuti, G. Sabatino, M. Chelli, **C. Bonaccini**, A. Tramontano, F. Lolli, A. Carotenuto, P. Rovero, A. M. Papini (2006): *Looking for native antigens triggering an autoantibody response in multiple sclerosis*. 2006 Chemistry & Biology of Peptides GRC, 19-24 febbraio 2006, Ventura Beach (Marriott, CA, USA) (Poster Communication)
7. A. Carotenuto, M. C. Alcaro, **C. Bonaccini**, F. Barbetti, F. Lolli, M. Chelli, A. Tramontano, E. Novellino, A. M. Papini, P. Rovero (2006): *Conformationally driven rational design of glycopeptides as synthetic probes for the detection of autoantibodies, biomarkers of Multiple Sclerosis*. 29th European Peptide Symposium, Gdansk (Poland), 3-8 settembre (Comunicazione Poster Tu494, J. Pept. Sci. (2006), 12 (Suppl.), p. 228).
8. **C. Bonaccini**, P. Gratteri, F. Melani (2004): *Molecular Modelling and QSAR Methodologies for the rational design and structural optimization of drug candidates*" ESMEC - European School of Medicinal Chemistry - XXIV Advanced course of Medicinal Chemistry and "E. Duranti" National Seminar for PhD Students. Urbino (Italia), 4-8 luglio 2004. (comunicazione poster e orale, p.26 Relazioni dei Dottorandi)
9. **C. Bonaccini**, P. Gratteri, F. Melani (2003): *Looking for a reliable orientation of ligands in their binding site: Glide vs. FIGO in the case study of PDE4 inhibitors*. Genome-based Drug Discovery International Conference. Firenze (Italia) 22-27 Marzo, 2004. (Comunicazione Poster, p.43 Book of Abstracts).

10. S. Selleri, C. Costagli, F. Bruni, A. Costanzo, G. Guerrini, G. Ciciani, P. Gratteri, **C. Bonaccini**, B. Costa, C. Martini: *Pyrazolo[1,5-a]pyrimidin-5-carboxyamides as New PBR Ligands*. **XXI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana**. Torino (Italia) 22-27 Giugno, 2003 (Comunicazione Poster FA-CP-056 Atti Vol.2)
11. P. Gratteri, M. N. Romanelli, **C. Bonaccini**: *GRID independent descriptors (GRIND) in the study of the  $\sigma$ -receptor subtype selectivity*. **XVIIth International Symposium on Medicinal Chemistry**. Barcellona, Spain, September 1-5 2002. (Comunicazione Poster P270, Drug Future (2002), 27 Suppl. A, 257.)
12. **C. Bonaccini**, P. Gratteri, G. Cruciani, F. Melani, M. Adamo, V. Dal Piaz: *GRID-docking study on ligands acting as inhibitors of the human phosphodiesterase 4*. **XVIIth International Symposium on Medicinal Chemistry**. Barcellona, Spain, September 1-5 2002. (Comunicazione Poster P145, Drug Future (2002), 27 Suppl. A, 139.)
13. **C. Bonaccini**, P. Gratteri, G. Cruciani: *GRID characterization of the Phosphodiesterase 4 binding site*. **33<sup>rd</sup> crystallographic course at the E. Majorana Centre "From genes to Drugs via Crystallography"**. Erice (Trapani, Italy) May 23 to June 2, 2002. (Comunicazione Poster P22, P47 Book of the Abstract, ISBN 0-9718823-1-2)
14. P. Gratteri, **C. Bonaccini**, F. Melani, S. Selleri, M. Adamo, C. Costagli, F. Bruni: *Ligand-Based Characterization Of PBR: An Application Of FILO Approach*. **First Magna Graecia Medicinal Chemistry Workshop On New Perspectives In Drug Research**. Copanello (Catanzaro, Italy) June 10-13, 2001 (Comunicazione Poster PC37, P.93 Book Of The Abstracts).
15. P. Gratteri, F. Melani, **C. Bonaccini**, M. Adamo, V. Dal Piaz, M. P. Giovannoni, C. Castellana, C. Vergelli: *X-ray Cristallographic-Based Design of PDE4 Inhibitors*. **First Magna Graecia Medicinal Chemistry Workshop on New Perspectives in Drug Research**. Copanello (Catanzaro, Italy) June 10-13, 2001. (Comunicazione Poster PC26, p.82 Book of the Abstracts).
16. F. Melani, P. Gratteri, **C. Bonaccini**, M. Adamo, V. Colotta: *Field-Interaction-Ligand-Optimization (FILO) in the development of 3d-qsar models for the rational design of selective adenosine receptor ligands*. **XVIth International Symposium on Medicinal Chemistry**. Bologna (Italy) September 18-22, 2000. (Comunicazione Poster PA-28, p.138 Abstracts).

## Comunicazioni orali a Congressi o giornate di studio

**Claudia Bonaccini\***, Jacopo Sgrignani, Paola Gratteri: *Molecular modelling studies on  $\alpha 4\beta 2$  nicotinic receptor ligands*. **XXII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana** Firenze, 10-15 settembre 2006. (Comunicazione Orale FAR-IL-007, p.163 Libro degli Atti).

Paola Gratteri, **Claudia Bonaccini\***, Fabrizio Melani *Preliminary docking study on PDE4 inhibitors*. Relazione presentata nell'ambito di una giornata di studio organizzata dal Dipartimento di Scienze Farmaceutiche con l'Almirall Prodesfarma, Firenze 19 dicembre 2003.

Paola Gratteri, **Claudia Bonaccini\***, Fabrizio Melani *Preparing a 3D protein structure for docking: GRID analysis of the interaction features of PDE4*. **ESF Training course on Molecular Interactions: New Frontiers for Computational Methods** Verona (Italy) July 20th - 25th 2002.