

PROCEDURA SELETTIVA PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA A PER IL SETTORE CONCORSUALE 03-C1 - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM06 - CHIMICA ORGANICA - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA E TECNOLOGIE DEL FARMACO DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.D. N. 1135 DEL 29.05.2019

VERBALE N. 2 - SEDUTA VALUTAZIONE TITOLI

Il 27 settembre 2019, alle ore 15:15 si riunisce, avvalendosi di strumenti telematici (collegamento via Skype) di lavoro collegiale, la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 Ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il Settore concorsuale 03-C1 – Settore scientifico-disciplinare CHIM/06 – CHIMICA ORGANICA - presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.D. n. 1614 del 17.07.2019 e composta da:

- Prof. Giancarlo Fabrizi – Professore Ordinario presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza";
- Prof. Enrico Marcantoni – Professore Ordinario presso la Scuola di Scienze e Tecnologie dell'Università di Camerino;
- Prof.ssa Roberta Bernini – Professore Associato presso il Dipartimento di Scienze Agrarie e Forestali dell'Università degli Studi della Tuscia di Viterbo.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 15:20.

Il Presidente informa la Commissione di aver ricevuto la documentazione in formato elettronico trasmessa dai candidati, ai sensi dell'art. 3 del bando di concorso.

La Commissione giudicatrice dichiara sotto la propria responsabilità che tra i componenti della Commissione ed i candidati non sussistono rapporti di coniugio, di parentela o di affinità, fino al quarto grado compreso, né altre situazioni di incompatibilità ai sensi degli artt. 51 e 52 del Codice di Procedura Civile e dell'art. 18, primo comma, lett. b) e c), della legge 30 dicembre 2010, n. 240.

I candidati alla procedura selettiva risultano essere i seguenti:

1. JAY ZUMBAR CHANDANSHIVE
2. CLAUDIO PIOMBINO
3. DEBORAH QUAGLIO

La Commissione procede quindi alla valutazione preliminare dei candidati con motivato giudizio sui titoli, sul curriculum e sulla produzione scientifica, secondo i criteri definiti dal D.M. n. 243/2011 e fissati in dettaglio nell'Allegato N.1 del Verbale della seduta del 13.09.2019.

L'elenco dei titoli e la valutazione preliminare di ciascun candidato vengono riportati in dettaglio nell'Allegato N.2, che costituisce parte integrante del presente verbale.

Sulla base della documentazione pervenuta da parte dei candidati, è ammessa sostenere il colloquio pubblico la Candidata Deborah Quaglio.

Il colloquio si terrà il giorno 18 ottobre alle ore 11:00 presso la sala riunioni dei laboratori di Chimica Organica, stanza n. 8, piano III dell'edificio CU032, Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco - Università degli Studi di Roma "La Sapienza" – Piazzale A. Moro, 5 – 00185 - Roma.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 17:00 del 27 settembre 2019.

Letto, confermato e sottoscritto.

La Commissione

Prof. Giancarlo Fabrizi - Presidente

Prof. Enrico Marcantoni - Componente

Prof.ssa Roberta Bernini - Segretario

PROCEDURA SELETTIVA PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA A PER IL SETTORE CONCORSUALE 03-C1 - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM06 - CHIMICA ORGANICA - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA E TECNOLOGIE DEL FARMACO DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.D. N. 1135 DEL 29.05.2019

Il 27 settembre 2019, alle ore 15:15 si riunisce, avvalendosi di strumenti telematici (collegamento via Skype) di lavoro collegiale, la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 Ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il Settore concorsuale 03-C1 – Settore scientifico-disciplinare CHIM/06 – CHIMICA ORGANICA - presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.D. n. 1614 del 17.07.2019 e composta da:

- Prof. Giancarlo Fabrizi – Professore Ordinario presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza";
- Prof. Enrico Marcantoni – Professore Ordinario presso la Scuola di Scienze e Tecnologie dell'Università di Camerino;
- Prof.ssa Roberta Bernini – Professore Associato presso il Dipartimento di Scienze Agrarie e Forestali dell'Università degli Studi della Tuscia di Viterbo.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 15:20.

La Commissione, accertato che i criteri generali fissati nella precedente riunione sono stati resi pubblici per più di sette giorni, inizia la verifica dei nomi dei Candidati, tenendo conto delle domande pervenute.

La Commissione, presa visione dell'elenco dei Candidati alla presente procedura, prende atto che i candidati da valutare ai fini della procedura selettiva sono n.3 e precisamente:

1. JAY ZUMBAR CHANDANSHIVE
2. CLAUDIO PIOMBINO
3. DEBORAH QUAGLIO

La Commissione, quindi, procede ad esaminare le domande di partecipazione alla procedura selettiva presentate dai candidati con i titoli allegati e le pubblicazioni.

Sulla base della documentazione esaminata, la commissione decide all'unanimità di non ammettere alla presente procedura selettiva di reclutamento i candidati JAY ZUMBAR CHANDANSHIVE e DANIELE PIOMBINO in quanto la documentazione trasmessa per via telematica al Direttore del Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" all'indirizzo di posta elettronica dipartimentoctf@cert.uniroma1.it **non è conforme** a quanto prescritto all'articolo n. 3 dal bando di ricerca Prot. n. 1135 DEL 29/05/2019 – Classif.VII/1.

La commissione procede pertanto all'analisi della documentazione trasmessa dalla Candidata DEBORAH QUAGLIO.

La Commissione verifica che i titoli allegati alla domanda siano stati certificati conformemente al bando.

Procede poi ad elencare analiticamente i titoli e le pubblicazioni trasmesse dalla Candidata.

La Commissione elenca, i titoli e le pubblicazioni valutabili (Allegato N.2/A).

Vengono esaminati i titoli e le pubblicazioni della Candidata DEBORAH QUAGLIO

La Commissione redige, quindi, una relazione contenente il profilo curricolare della Candidata con una breve valutazione collegiale del profilo, anche in relazione alla linea di ricerca e ad eventuali altri requisiti stabiliti dal Bando, una valutazione della produttività scientifica ed una valutazione bibliometrica, in accordo a quanto riportato nel Verbale n. 1.

La Commissione inizia la valutazione dei titoli, delle pubblicazioni e della tesi di dottorato della Candidata.

Il Presidente ricorda che le pubblicazioni redatte in collaborazione possono essere valutate sulla base dei criteri individuati nella prima riunione.

Candidata **DEBORAH QUAGLIO**

Da parte di ciascun Commissario, si procede all'esame dei titoli e delle pubblicazioni ai fini della formulazione dei singoli giudizi da parte degli stessi commissari. Ciascun Commissario formula il proprio giudizio individuale e la Commissione quello collegiale. I giudizi dei singoli Commissari e quello collegiale sono allegati al presente verbale quale sua parte integrante (Allegato 2/B).

La Commissione, dopo aver effettuato una discussione collegiale sul profilo e sulla produzione scientifica della Candidata, ammette la Dott.ssa Deborah Quaglio alla fase successiva della procedura.

Il Presidente invita il Responsabile del procedimento a comunicare alla dott.ssa Deborah Quaglio la data di convocazione per lo svolgimento del colloquio in forma seminariale previsto dal bando.

La Commissione viene sciolta alle ore 17:00 e si riconvoca per il giorno 18 ottobre 2019 alle ore 11:00.

Letto approvato e sottoscritto seduta stante.

La Commissione

Prof. Giancarlo Fabrizi - Presidente

Prof. Enrico Marcantoni - Componente

Prof.ssa Roberta Bernini - Segretario

PROCEDURA SELETTIVA PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA A PER IL SETTORE CONCORSUALE 03-C1 - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM06 - CHIMICA ORGANICA - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA E TECNOLOGIE DEL FARMACO DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.D. N. 1135 DEL 29.05.2019

Il 27 settembre 2019, alle ore 15:15 si riunisce, avvalendosi di strumenti telematici (collegamento via Skype) di lavoro collegiale, la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 Ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il Settore concorsuale 03-C1 – Settore scientifico-disciplinare CHIM/06 – CHIMICA ORGANICA - presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.D. n. 1614 del 17.07.2019 e composta da:

- Prof. Giancarlo Fabrizi – Professore Ordinario presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza";
- Prof. Enrico Marcantoni – Professore Ordinario presso la Scuola di Scienze e Tecnologie dell'Università di Camerino;
- Prof.ssa Roberta Bernini – Professore Associato presso il Dipartimento di Scienze Agrarie e Forestali dell'Università degli Studi della Tuscia di Viterbo.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 15:20.

La Commissione prende atto dei titoli per i quali sia stata presentata idonea documentazione ai sensi dell'art. 3 del Bando.

CANDIDATA: DEBORAH QUAGLIO

VERIFICA TITOLI VALUTABILI

1. DOTTORATO DI RICERCA in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università degli di Studi di Roma "La Sapienza" nel 2017. È VALUTABILE
2. Dottorando Visitatore presso il CERM di Firenze (gennaio 2016 – settembre 2016). È VALUTABILE
3. Corso OSSSAS presso l'Università degli di Studi di Roma "La Sapienza" (aprile-giugno 2013). È VALUTABILE
4. Abilitazione all'esercizio della professione di Farmacista (novembre 2016). È VALUTABILE
5. Titolare di assegni di ricerca di tipo B presso l'Università degli di Studi di Roma "La Sapienza" (da dicembre 2016 ad oggi). È VALUTABILE
6. Partecipazione al progetto di ricerca AIRC (2018 – 2022) - IG#20801 New multi-targeting approaches in Hedgehog-dependent cancers. È VALUTABILE
7. Partecipazione al PROGETTO DI RICERCA UNIVERSITÀ Sapienza 2017, RM11715C77E550EB – Studio multi-metodologico dei prodotti della filiera agroalimentare della canapa industriale. È VALUTABILE
8. Titolarità di Fondi di Ricerca PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Sapienza 2016 - Sintesi di analoghi del Glabrescione B e nuove strategie nel drug delivery per la cura del medulloblastoma. È VALUTABILE
9. Titolarità di Fondi di Ricerca PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Università La Sapienza 2015 – Sintesi di Inibitori della Via Hedgehog per il Trattamento del Medulloblastoma e Studi NMR di Interazione Farmaco /Recettore. È VALUTABILE

10. Partecipazione al progetto di ricerca - PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Università La Sapienza 2014 – Veicolazione Cerebrale di Nuovi Inibitori della Via di Trasduzione del Segnale di Hedgehog. È VALUTABILE
11. Attività di supporto alla didattica, tutoraggio per studenti laureandi e partecipazione agli esami di profitto per la disciplina “Chimica Organica” del corso di Laurea in Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza” a partire dal 2017. È VALUTABILE
12. Esercitazioni teoriche in aula per il corso di “Chimica Organica” del corso di Laurea in Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza” dal 2017. È VALUTABILE
13. Membro ufficiale di Commissione Esaminatrice per la discipline “Chimica Organica” nominato dal Consiglio di corso di Studio di Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza” dal 2019. È VALUTABILE
14. Attività di tutoraggio relativa al Progetto di Alternanza Scuola-Lavoro presso Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma. È VALUTABILE

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI

1. V. Ghini; D. Quaglio; C. Luchinat; P. Turano. NMR for sample quality assessment in metabolomics. *New Biotechnol.* (2019), 52:25-34. È VALUTABILE
2. D. Quaglio; N. Zhdanovskaya; G. Tobajas; V. Cuartas; S. Balducci; M. S. Christodoulou; G. Fabrizi; M. Gargantilla; E.-M. Priego; Á. C. Pestaña; D. Passarella; I. Screpanti; B. Botta; R. Palermo; M. Mori; F. Ghirga; M.-J. Pérez-Pérez. Chalcones and Chalcone-mimetic Derivatives as Notch Inhibitors in a Model of T-cell Acute Lymphoblastic Leukemia. *ACS Med. Chem. Lett.* (2019), 10:639-43. È VALUTABILE
3. D. Quaglio; G. Zappia; E. De Paolis; S. Balducci; B. Botta; F. Ghirga. Olefin metathesis reaction as a locking tool for macrocycle and mechanomolecule construction. *Org. Chem. Front.* (2018), 5:3022-55. È VALUTABILE
4. S. Corradi; G. Mazzocanti; F. Ghirga; D. Quaglio; L. Nevola; C. Massera; F. Ugozzoli; G. Giannini; A. Ciogli; I. D’Acquarica. Synthesis of Bromoundecyl Resorc[4]arenes and Applications of the Cone Stereoisomer as Selector for Liquid Chromatography. *J. Org. Chem.* (2018), 83(15):7683-93. È VALUTABILE
5. A. Calcaterra; V. Iovine; B. Botta; D. Quaglio; I. D’Acquarica; A. Ciogli; A. Iazzetti; R. Alfonsi; L. Lo Spinoso Severini; P. Infante; L. Di Marcotullio; M. Mori; F. Ghirga. Chemical, computational and functional insights into the chemical stability of the Hedgehog pathway inhibitor GANT61. *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry* (2018), 33(1):349-58. È VALUTABILE
6. M. Mori; L. Tottone; D. Quaglio; N. Zhdanovskaya; C. Ingallina; M. Fusto; F. Ghirga; G. Peruzzi; M. E. Crestoni; F. Simeoni; F. Giulimondi; C. Talora; B. Botta; I. Screpanti; R. Palermo. Identification of a novel chalcone derivative that inhibits Notch signaling in T-cell acute lymphoblastic leukemia. *Scientific Reports* (2017), 7(1):2213. È VALUTABILE
7. F. Aiello; F. Balzano; F. Ghirga; I. D’Acquarica; B. Botta; G. Uccello-Barretta; D. Quaglio. First detection of a ruthenium-carbene-resorc[4]arene complex during the progress of a metathesis reaction. *EUR Journal of Organic Chemistry* (2017), 17: 2407-15. È VALUTABILE

8. P. Infante; R. Alfonsi; C. Ingallina; D. Quaglio; F. Ghirga; I. D'Acquarica; F. Bernardi; L. Di Magno; G. Canettieri; I. Screpanti; A. Gulino; B. Botta; M. Mori; L. Di Marcotullio. Inhibition of Hedgehog-dependent tumors and cancer stem cells by a newly identified naturally occurring chemotype. *Cell death & Disease* (2016) 7(9):2376. È VALUTABILE
9. I. D'Acquarica; F. Ghirga; D. Quaglio; A. Cerreto; C. Ingallina; A. Tafi; B. Botta. Molecular recognition of natural products by resorc[4]arene receptors. *Curr. Pharm. Des.* (2016) 22(12):1715-29. È VALUTABILE
10. C. Ingallina; I. D'Acquarica; G. Delle Monache; F. Ghirga; D. Quaglio; P. Ghirga; S. Berardozzi; V. Markovic; B. Botta. The Pictet-Spengler reaction still on stage. *Curr. Pharm. Des.* (2016) 22(12):1808-50.. È VALUTABILE
11. F. Ghirga; D. Quaglio; P. Ghirga; S. Berardozzi; G. Zappia; B. Botta; M. Mori; I. D'Acquarica. The occurrence of enantioselectivity in nature: the case of (S)-norcoclaurine. *Chirality* (2016) 28(3):169-80. È VALUTABILE
12. F. Ghirga; D. Quaglio; V. Iovine; B. Botta; M. Pierini, L. Mannina; A. P. Sobolev; F. Ugozzoli; I. D'Acquarica. Synthesis of a Double-Spanned-Resorc[4]arene via Ring-Closing Metathesis and Calculation of Aggregation Propensity. *J. Org. Chem.* (2014) 79(22):11051-60. È VALUTABILE

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La produzione complessiva della Candidata QUAGLIO consiste in 13 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS, delle quali 12 selezionate per la presente selezione che hanno i seguenti indicatori bibliometrici:

Impact factor totale: 45.6

Impact factor medio per pubblicazione: 3.8

Numero totale di citazioni: 70

Numero medio di citazioni per prodotto: 5.83

Indice di Hirsch: 5

La Candidata ha inoltre partecipato a numerosi congressi nazionali e internazionali ed è stata relatrice in 5 di essi.

È inoltre titolare di 2 brevetti.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 17:00.

Letto, approvato e sottoscritto.

La Commissione

Prof. Giancarlo Fabrizi - Presidente

Prof. Enrico Marcantoni - Componente

Prof.ssa Roberta Bernini - Segretario

PROCEDURA SELETTIVA PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA A PER IL SETTORE CONCORSUALE 03-C1 - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM06 - CHIMICA ORGANICA - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA E TECNOLOGIE DEL FARMACO DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.D. N. 1135 DEL 29.05.2019

Il 27 settembre 2019, alle ore 15:15 si riunisce, avvalendosi di strumenti telematici (collegamento via Skype) di lavoro collegiale, la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 Ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il Settore concorsuale 03-C1 – Settore scientifico-disciplinare CHIM/06 – CHIMICA ORGANICA - presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.D. n. 1614 del 17.07.2019 e composta da:

- Prof. Giancarlo Fabrizi – Professore Ordinario presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza";
- Prof. Enrico Marcantoni – Professore Ordinario presso la Scuola di Scienze e Tecnologie dell'Università di Camerino;
- Prof.ssa Roberta Bernini – Professore Associato presso il Dipartimento di Scienze Agrarie e Forestali dell'Università degli Studi della Tuscia di Viterbo.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 15:20.

La Commissione prosegue i propri lavori e procede ad elaborare la valutazione individuale e collegiale dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati.

CANDIDATA: DEBORAH QUAGLIO

COMMISSARIO 1

Prof. Giancarlo Fabrizi

TITOLI

1. DOTTORATO DI RICERCA in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università degli di Studi di Roma "La Sapienza" nel 2017.
2. Dottorando Visitatore presso il CERM di Firenze (gennaio 2016 – settembre 2016)
3. Corso OSSAS - presso l'Università degli di Studi di Roma "La Sapienza" (aprile-giugno 2013)
4. Abilitazione all'esercizio della professione di Farmacista (novembre 2016)
5. Titolare di assegni di ricerca di tipo B presso l'Università degli di Studi di Roma "La Sapienza" (da dicembre 2016 ad oggi).
6. Partecipazione al progetto di ricerca AIRC (2018 – 2022) - IG#20801 New multi-targeting approaches in Hedgehog-dependent cancers.
7. Partecipazione al PROGETTO DI RICERCA UNIVERSITÀ Sapienza 2017, RM11715C77E550EB – Studio multi-metodologico dei prodotti della filiera agroalimentare della canapa industriale.
8. Titolarità di Fondi di Ricerca PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Sapienza 2016 - Sintesi di analoghi del Glabrescione B e nuove strategie nel drug delivery per la cura del medulloblastoma.
9. Titolarità di Fondi di Ricerca PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Università La Sapienza 2015 – Sintesi di Inibitori della Via Hedgehog per il Trattamento del Medulloblastoma e Studi NMR di Interazione Farmaco /Recettore

10. Partecipazione al progetto di ricerca - PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Università La Sapienza 2014 – Veicolazione Cerebrale di Nuovi Inibitori della Via di Trasduzione del Segnale di Hedgehog.
11. Attività di supporto alla didattica, tutoraggio per studenti laureandi e partecipazione agli esami di profitto per la disciplina “Chimica Organica” del corso di Laurea in Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza” a partire dal 2017.
12. Esercitazioni teoriche in aula per il corso di “Chimica Organica” del corso di Laurea in Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza”
13. Membro ufficiale di Commissione Esaminatrice dal 2019 per la discipline “Chimica Organica”, nominato dal Consiglio di corso di Studio di Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza”
14. Attività di tutoraggio relativa al Progetto di Alternanza Scuola-Lavoro presso Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma.

La Candidata QUAGLIO si è laureata in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche presso l’Università degli studi di Roma “La Sapienza” dove ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche nel 2017, discutendo la tesi “NMR Spectroscopy: A versatile tool for the investigation of organic reaction mechanism and metabolomics analysis”. A partire dal dicembre 2016 ad oggi è stata titolare di vari assegni di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza” durante lo svolgimento dei quali ha svolto attività di ricerca pienamente inerente al SSD oggetto del concorso. La Dott.ssa Quaglio è stata inoltre titolare di fondi di ricerca. La Candidata ha svolto un’intensa attività didattica a livello universitario presso “La Sapienza” consistente in a) attività di supporto alla didattica, tutoraggio per studenti laureandi e partecipazione agli esami di profitto per il corso di Chimica Organica (dal 2017 ad oggi) del corso di Laurea in Farmacia; b) attività di tutoraggio relativa al Progetto di Alternanza Scuola-Lavoro presso Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco (dal 2017 ad oggi).

L’analisi dei titoli prodotti dalla candidata mette in luce un profilo curricolare di ottimo livello, sia per quanto riguarda la continuità temporale dell’attività di ricerca svolta che per la parallela attività didattica che le è stata affidata per la sua competenza nelle discipline oggetto dei corsi di competenza del Dipartimento di appartenenza. È infine rilevante che la candidata è stata titolare di fondi di ricerca a riconoscimento di un percorso verso l’autonomia scientifica.

ELENCO PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE SELEZIONATE

1. V. Ghini; D. Quaglio; C. Luchinat; P. Turano. NMR for sample quality assessment in metabolomics. *New Biotechnol.* (2019), 52:25-34. *Il lavoro descrive l’impiego della tecnica NMR per lo studio dei prodotti metabolici secondari in matrici biologiche complesse (urine, siero e plasma). I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è pubblicato su rivista posizionata Q1, congruente con il SSD-CHIM/06 e attinente alle tematiche del bando.*
2. D. Quaglio; N. Zhdanovskaya; G. Tobajas; V. Cuartas; S. Balducci; M. S. Christodoulou; G. Fabrizi; M. Gargantilla; E.-M. Priego; Á. C. Pestaña; D. Passarella; I. Screpanti; B. Botta; R. Palermo; M. Mori; F. Ghirga; M.-J. Pérez-Pérez. Chalcones and Chalcone-mimetic Derivatives as Notch Inhibitors in a Model of T-cell Acute Lymphoblastic Leukemia. *ACS Med. Chem. Lett.* (2019), 10:639-43. *Il lavoro descrive la progettazione, identificazione e sintesi di benzalacetofenoni (calconi) e loro analoghi tetraidronaftalenici come nuovi promettenti inibitori della via di trasduzione del segnale di Notch. Le molecole sintetizzate hanno mostrato una buona attività inibitoria in linee cellulari di leucemia linfoblastica acuta a cellule T. I risultati ottenuti sono ottimi. Il lavoro è pubblicato su rivista posizionata Q2, congruente con il SSD-CHIM/06 e attinente alle tematiche del bando.*
3. D. Quaglio; G. Zappia; E. De Paolis; S. Balducci; B. Botta; F. Ghirga. Olefin metathesis reaction as a locking tool for macrocycle and mechanomolecule construction. *Org. Chem. Front.* (2018), 5:3022-55. *Il lavoro è una review che descrive nelle sue diverse sfaccettature l’applicazione della reazione di metatesi olefinica per la costruzione di strutture macrocicliche*

complesse, quali i calixareni e i MIMs (mechanically interlocked molecules). La review mette in evidenza l'importanza della reazione di metatesi e le sue future applicazioni nella preparazione di "molecular machines". I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è pubblicato su rivista posizionata Q1, congruente con il SSD-CHIM/06 e attinente alle tematiche del bando.

4. S. Corradi; G. Mazzocanti; F. Ghirga; D. Quaglio; L. Nevola; C. Massera; F. Ugozzoli; G. Giannini; A. Ciogli; I. D'Acquarica. Synthesis of Bromoundecyl Resorc[4]arenes and Applications of the Cone Stereoisomer as Selector for Liquid Chromatography. *J. Org. Chem.* (2018), 83(15):7683-93. *Il lavoro descrive la sintesi di resorc[4]areni bromoundecanolic, composti macrociclici contenenti quattro unità di resorcinolo connesse tra loro mediante ponti metinici, come efficienti selettori per la cromatografia liquida ad alte prestazioni di combretastatine naturali e semisintetiche. I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è pubblicato su rivista posizionata Q1, congruente con il SSD-CHIM/06 e attinente alle tematiche del bando.*
5. A. Calcaterra; V. Iovine; B. Botta; D. Quaglio; I. D'Acquarica; A. Ciogli; A. Iazzetti; R. Alfonsi; L. Lo Spinoso Severini; P. Infante; L. Di Marcotullio; M. Mori; F. Ghirga. Chemical, computational and functional insights into the chemical stability of the Hedgehog pathway inhibitor GANT61. *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry* (2018), 33(1):349-58. *Questo lavoro interdisciplinare chiarisce il meccanismo e la cinetica di idrolisi del GANT61, composto antitumorale inibitore della via di segnalazione di Hedgehog, attraverso studi di spettroscopia NMR, cromatografici, di modellistica molecolare e saggi funzionali su linee cellulari. Nel lavoro è stato messo a punto un efficiente protocollo sintetico del GANT61 e del suo derivato idrolizzato GANT61-D, che hanno permesso lo svolgimento di studi analitici e funzionali. I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è pubblicato su rivista posizionata Q1, congruente con il SSD-CHIM/06 e attinente alle tematiche del bando.*
6. M. Mori; L. Tottone; D. Quaglio; N. Zhdanovskaya; C. Ingallina; M. Fusto; F. Ghirga; G. Peruzzi; M. E. Crestoni; F. Simeoni; F. Giulimondi; C. Talora; B. Botta; I. Screpanti; R. Palermo. Identification of a novel chalcone derivative that inhibits Notch signaling in T-cell acute lymphoblastic leukemia. *Scientific Reports* (2017), 7(1):2213. *Il lavoro descrive, mediante un approccio chemo-informatico di clusterizzazione di più di 1000 prodotti di origine naturale e sintetica, l'identificazione di una molecola a struttura 1,3-diaril-2-propenoica, potenzialmente in grado di inibire la via di trasduzione del segnale di Notch. Sono stati progettati e sintetizzati 26 derivati della molecola selezionata mediante la reazione di condensazione di Claisen-Schmidt, che hanno permesso un aumento di attività biologica, di stabilità, e la delineazione della SAR (relazione struttura attività). I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è pubblicato su rivista posizionata Q1, congruente con il SSD-CHIM/06 e attinente alle tematiche del bando.*
7. F. Aiello; F. Balzano; F. Ghirga; I. D'Acquarica; B. Botta; G. Uccello-Barretta; D. Quaglio. First detection of a ruthenium-carbene-resorc[4]arene complex during the progress of a metathesis reaction. *EUR Journal of Organic Chemistry* (2017), 17: 2407-15. *Il lavoro descrive l'identificazione, mediante spettroscopia ad alta risoluzione (600 MHz) ¹H e ³¹P NMR e spettroscopia DOSY, del complesso rutenio-carbene-resorc[4]arene. Tale complesso rappresenta l'intermedio chiave della reazione di metatesi olefinica effettuata sul bicicloalchene a struttura resorc[4]arenica in conformazione sedia, dimostrando il meccanismo di RCM-CM su tali macrocicli. I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è pubblicato su rivista posizionata Q2, congruente con il SSD-CHIM/06 e attinente alle tematiche del bando.*
8. P. Infante; R. Alfonsi; C. Ingallina; D. Quaglio; F. Ghirga; I. D'Acquarica; F. Bernardi; L. Di Magno; G. Canettieri; I. Screpanti; A. Gulino; B. Botta; M. Mori; L. Di Marcotullio. Inhibition of Hedgehog-dependent tumors and cancer stem cells by a newly identified naturally occurring chemotype. *Cell death & Disease* (2016) 7(9):e2376. *Il lavoro descrive l'identificazione, mediante studi di modellistica molecolare, di 17 molecole potenzialmente attive quali inibitori*

della via di trasduzione del segnale di Hedgehog e, più nel dettaglio, del recettore Smo. L'identità strutturale dei composti selezionati in silico è stata effettuata mediante spettroscopia NMR e la purezza determinata mediante HPLC in fase inversa. Dagli studi in vitro, un calcone naturale penta-OMe è risultato il più attivo della serie. La sintesi chimica dello stesso è stata effettuata mediante condensazione di Claisen-Schmidt per permettere i successivi studi in vivo. I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è pubblicato su rivista posizionata Q1 congruente pubblicato su rivista con il SSD-CHIM/06 e attinente alle tematiche del bando.

9. I. D'Acquarica; F. Ghirga; D. Quaglio; A. Cerreto; C. Ingallina; A. Tafi; B. Botta. Molecular recognition of natural products by resorc[4]arene receptors. *Curr. Pharm. Des.* (2016) 22(12):1715-29. *Il lavoro è una review riguardante i diversi approcci sintetici volti alla sintesi dei macrocicli a struttura resorc[4]arenica, quali recettori artificiali nel riconoscimento molecolare di prodotti di origine naturale. I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è pubblicato su rivista su rivista posizionata Q3 congruente con il SSD-CHIM/06 e attinente alle tematiche del bando.*
10. C. Ingallina; I. D'Acquarica; G. Delle Monache; F. Ghirga; D. Quaglio; P. Ghirga; S. Berardozzi; V. Markovic; B. Botta. The Pictet-Spengler reaction still on stage. *Curr. Pharm. Des.* (2016) 22(12):1808-50. *Il lavoro è una review che tratta i diversi aspetti della reazione di Pictet-Spengler, sia per la sintesi di nuclei tetraidroisochinolinici e tetraidro- β -carbolinici che per la preparazione di strutture complesse contenenti tali nuclei base. I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è pubblicato su rivista su rivista posizionata Q3 congruente con il SSD-CHIM/06 e attinente alle tematiche del bando.*
11. F. Ghirga; D. Quaglio; P. Ghirga; S. Berardozzi; G. Zappia; B. Botta; M. Mori; I. D'Acquarica. The occurrence of enantioselectivity in nature: the case of (S)-norcoclaurine. *Chirality* (2016) 28(3):169-80. *Il lavoro è una review che presenta dal punto di vista sintetico, analitico e biochimico l'alcaloide (S)-norcoclaurina. I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è pubblicato su rivista posizionata Q3, congruente con il SSD-CHIM/06 ma non attinente alle tematiche del bando.*
12. F. Ghirga; D. Quaglio; V. Iovine; B. Botta; M. Pierini, L. Mannina; A. P. Sobolev; F. Ugozzoli; I. D'Acquarica. Synthesis of a Double-Spanned-Resorc[4]arene via Ring-Closing Metathesis and Calculation of Aggregation Propensity. *J. Org. Chem.* (2014) 79(22):11051-60. *Il lavoro descrive l'impiego della reazione di metatesi olefinica, partendo dallo stereoisomero cono del resorc[4]arene ω -undecenilico, per la sintesi di strutture altamente pre-organizzate. Il principale prodotto di RCM è stato sottoposto ad analisi cristallografica mediante raggi X e a studi di auto-associazione in soluzione mediante spettroscopia UV-vis. I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è pubblicato su rivista posizionata Q1, congruente con il SSD-CHIM/06 e attinente alle tematiche del bando.*

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La Candidata QUAGLIO presenta alla valutazione una produzione complessiva pari a 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, 5 comunicazioni orali a congresso e 10 comunicazioni poster, oltre a numerose partecipazioni a congresso nelle quali ha contribuito ai lavori presentati dai componenti del gruppo di ricerca.

L'analisi della produzione scientifica della Candidata ha fornito i seguenti valori bibliometrici:

Impact factor totale: 45.6

Impact factor medio per pubblicazione: 3.8

Numero totale di citazioni: 70

Numero medio di citazioni per prodotto: 5.83

Indice di Hirsch: 5

La Candidata ha inoltre partecipato a numerosi congressi nazionali e internazionali ed è stata relatrice in 5 di essi.

È inoltre titolare di 2 brevetti.

Valutazione della produzione complessiva

La Candidata QUAGLIO presenta una notevole produzione scientifica e continua nel tempo su riviste a diffusione internazionale dotate di ottima collocazione editoriale che è valutabile molto positivamente in base ai valori degli indici bibliometrici. Le pubblicazioni presentate evidenziano che la Candidata ha maturato esperienza e competenze specifiche in ambiti di ricerca attinenti alle tematiche richieste nel bando del presente concorso.

CANDIDATA: **DEBORAH QUAGLIO**

COMMISSARIO 2

Prof. Enrico Marcantoni

TITOLI

1. DOTTORATO DI RICERCA in Scienze Farmaceutiche (XXIX Ciclo) conseguito presso l'Università degli di Studi di Roma "La Sapienza" nel 2017.
2. Dottorando Visitatore presso il CERM di Firenze (gennaio 2016 – settembre 2016).
3. Corso OSSSAS - presso l'Università degli di Studi di Roma "La Sapienza" (aprile-giugno 2013).
4. Abilitazione all'esercizio della professione di Farmacista (novembre 2016).
5. Titolare di assegni di ricerca di tipo B presso l'Università degli di Studi di Roma "La Sapienza" (da dicembre 2016 ad oggi).
6. Partecipazione al progetto di ricerca AIRC (2018 – 2022) - IG#20801 New multi-targeting approaches in Hedgehog-dependent cancers.
7. Partecipazione al PROGETTO DI RICERCA UNIVERSITÀ Sapienza 2017, RM11715C77E550EB – Studio multi-metodologico dei prodotti della filiera agroalimentare della canapa industriale.
8. Titolarità di Fondi di Ricerca PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Sapienza 2016 - Sintesi di analoghi del Glabrescione B e nuove strategie nel drug delivery per la cura del medulloblastoma.
9. Titolarità di Fondi di Ricerca PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Università La Sapienza 2015 – Sintesi di Inibitori della Via Hedgehog per il Trattamento del Medulloblastoma e Studi NMR di Interazione Farmaco /Recettore.
10. Partecipazione al progetto di ricerca - PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Università La Sapienza 2014 – Veicolazione Cerebrale di Nuovi Inibitori della Via di Trasduzione del Segnale di Hedgehog.
11. Attività di supporto alla didattica, tutoraggio per studenti laureandi e partecipazione agli esami di profitto per la disciplina "Chimica Organica" del corso di Laurea in Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" a partire dal 2017.
12. Esercitazioni teoriche in aula per il corso di "Chimica Organica" del corso di Laurea in Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".
13. Membro ufficiale di Commissione Esaminatrice dal 2019 per la discipline "Chimica Organica", nominato dal Consiglio di corso di Studio di Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".
14. Attività di tutoraggio relativa al Progetto di Alternanza Scuola-Lavoro presso Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma.

La Candidata QUAGLIO, laureata in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche il 29/01/2013 con votazione di 110 e lode presso la sapienza Università di Roma, ha conseguito presso la stessa Università il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Farmaceutiche il giorno 31/01/2017. Sotto la supervisione del Prof. Bruno Botta durante il corso di dottorato ha studiato lo sviluppo delle reazioni di metatesi olefinica nella sintesi di ricettori artificiali a struttura molecolare complessa. Durante il

dottorato la candidata è stata ospite (dal 13/01/2016 al 30/09/2016) del Centro di Risonanza Magnetica dell'Università di Firenze e coinvolta in progetti di ricerca nel campo della metabolomica ed ha acquisito familiarità con l'acquisizione di spettri NMR di campioni biologici di origine umana e culture cellulari. Nel corso del suo percorso formativo e professionale, la Dott.ssa Quaglio ha svolto attività di ricerca pienamente inerente al SSD del concorso ed è stata titolare di fondi di ricerca.

La Dott.ssa Quaglio ha maturato un'ottima esperienza didattica di livello universitario presso la Sapienza Università di Roma con attività di supporto ai Corsi di Chimica organica e con Esercitazioni di Chimica Organica. Nell'anno accademico 2018/2019 la Dott.ssa Quaglio è stata nominata cultore della materia alle sessioni di esame di profitto del Corso di Chimica Organica del Corso di Laurea in Farmacia.

L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata mette in luce, sulla base ai criteri stabiliti nel verbale n. 1, un profilo curricolare di ottimo livello.

ELENCO PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE SELEZIONATE

1. V. Ghini; D. Quaglio; C. Luchinat; P. Turano. NMR for sample quality assessment in metabolomics. *New Biotechnol.* (2019), 52:25-34. *Il lavoro mostra lo sviluppo degli approcci NMR nella valutazione dell'impatto di differenti pre-trattamenti analitici sulla qualità di campioni biologici dedicati alla metabolomica. Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
2. D. Quaglio; N. Zhdanovskaya; G. Tobajas; V. Cuartas; S. Balducci; M. S. Christodoulou; G. Fabrizi; M. Gargantilla; E.-M. Priego; Á. C. Pestaña; D. Passarella; I. Screpanti; B. Botta; R. Palermo; M. Mori; F. Ghirga; M.-J. Pérez-Pérez. Chalcones and Chalcone-mimetic Derivatives as Notch Inhibitors in a Model of T-cell Acute Lymphoblastic Leukemia. *ACS Med. Chem. Lett.* (2019), 10:639-43. *La progettazione e la identificazione di un numero di calconi e composti calconi mimetici hanno permesso di sintetizzare dei nuovi promettenti inibitori della via di trasduzione del segnale di Notch. Il lavoro è pubblicato su rivista di buono livello (Q2), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
3. D. Quaglio; G. Zappia; E. De Paolis; S. Balducci; B. Botta; F. Ghirga. Olefin metathesis reaction as a locking tool for macrocycle and mechanomolecule construction. *Org. Chem. Front.* (2018), 5:3022-55. *La review mette in evidenza l'importanza della reazione di metatesi di olefine e tiene conto di diverse strategie sintetiche che coinvolgono tale procedura evidenziandone la crescente utilità e il potenziale futuro nella sintesi di macchine molecolari. Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
4. S. Corradi; G. Mazzocanti; F. Ghirga; D. Quaglio; L. Nevola; C. Massera; F. Ugozzoli; G. Giannini; A. Ciogli; I. D'Acquarica. Synthesis of Bromoundecyl Resorc[4]arenes and Applications of the Cone Stereoisomer as Selector for Liquid Chromatography. *J. Org. Chem.* (2018), 83(15):7683-93. *Nel proseguire lo studio sulle proprietà dei resorc[4]areni C-alchilati, la ricerca ha messo come derivati contenenti catene bromoundecanoliche, possono comportarsi da efficienti selettori per la cromatografia liquida ad alte prestazioni di combretastatine naturali e semisintetiche. Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
5. A. Calcaterra; V. Iovine; B. Botta; D. Quaglio; I. D'Acquarica; A. Ciogli; A. Iazzetti; R. Alfonsi; L. Lo spinoso Severini; P. Infante; L. Di Marcotullio; M. Mori; F. Ghirga. Chemical, computational and functional insights into the chemical stability of the Hedgehog pathway inhibitor GANT61. *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry* (2018), 33(1):349-58. *I risultati ottenuti hanno evidenziato l'importanza dell'interdisciplinarietà nel chiarire il meccanismo e la cinetica di idrolisi del GANT61, composto antitumorale inibitore della via di segnalazione di Hedgehog. Studi di spettroscopia NMR, cromatografici, di modellistica molecolare e saggi funzionali su linee cellulari hanno permesso di arrivare ad un efficiente*

protocollo sintetico del GANT61 e del suo derivato idrolizzato GANT61-D. Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.

6. M. Mori; L. Tottone; D. Quaglio; N. Zhdanovskaya; C. Ingallina; M. Fusto; F. Ghirga; G. Peruzzi; M. E. Crestoni; F. Simeoni; F. Giulimondi; C. Talora; B. Botta; I. Screpanti; R. Palermo. Identification of a novel chalcone derivative that inhibits Notch signaling in T-cell acute lymphoblastic leukemia. *Scientific Reports* (2017), 7(1):2213. *Attraverso un importante approccio chemo-informatico di clusterizzazione di più di 1000 molecole organiche naturali e sintetiche, è stata possibile l'identificazione di una molecola a struttura 1,3-diaril-2-propenoica, potenzialmente in grado di inibire la via di trasduzione del segnale di Notch. Da questa, mediante la reazione di condensazione di Claisen-Schmidt, sono stati sintetizzati 26 suoi derivati che hanno permesso un aumento di attività biologica, di stabilità, e la delineazione della SAR (relazione struttura attività). Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
7. F. Aiello; F. Balzano; F. Ghirga; I. D'Acquarica; B. Botta; G. Uccello-Barretta; D. Quaglio. First detection of a ruthenium-carbene-resorc[4]arene complex during the progress of a metathesis reaction. *EUR Journal of Organic Chemistry* (2017), 17: 2407-15. *Per la prima volta, mediante spettroscopia ad alta risoluzione (600 MHz) ¹H e ³¹P NMR e spettroscopia DOSY, è stata descritta la struttura di un complesso rutenio-carbene-resorc[4]arene. Tale complesso rappresenta l'intermedio chiave della reazione di metatesi olefinica effettuata sul bicicloalchene a struttura resorc[4]arenica in conformazione sedia, dimostrando il meccanismo di RCM-CM su tali macrocicli. Il lavoro è pubblicato su rivista di buono livello (Q2), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
8. P. Infante; R. Alfonsi; C. Ingallina; D. Quaglio; F. Ghirga; I. D'Acquarica; F. Bernardi; L. Di Magno; G. Canettieri; I. Screpanti; A. Gulino; B. Botta; M. Mori; L. Di Marcotullio. Inhibition of Hedgehog-dependent tumors and cancer stem cells by a newly identified naturally occurring chemotype. *Cell death & Disease* (2016) 7(9):2376. *Si è potuto mettere in evidenza come inibitori di Hedgehog sono degli validi sistemi nel trattamento di un'ampio range di tumori. L'identità strutturale dei composti selezionati in silico è stata effettuata mediante spettroscopia NMR e la purezza determinata mediante HPLC in fase inversa. Dai i primi studi in vitro, un calcone naturale penta-OMe è risultato il più attivo della serie e la sua sintesi chimica è stata possibile sfruttando una condensazione di Claisen-Schmidt. L'ottimizzazione della procedura sintetica permette di ottenere sufficienti quantità della molecola target per successivi studi in vivo. Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
9. I. D'Acquarica; F. Ghirga; D. Quaglio; A. Cerreto; C. Ingallina; A. Tafi; B. Botta. Molecular recognition of natural products by resorc[4]arene receptors. *Curr. Pharm. Des.* (2016) 22(12):1715-29. *E' stata scritta una review sugli attuali diversi approcci sintetici per la sintesi dei macrocicli a struttura resorc[4]arenica, da poter utilizzare come recettori artificiali nel riconoscimento molecolare di prodotti di origine naturale. Il lavoro è pubblicato su rivista di discreto livello (Q3), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
10. C. Ingallina; I. D'Acquarica; G. Delle Monache; F. Ghirga; D. Quaglio; P. Ghirga; S. Berardozzi; V. Markovic; B. Botta. The Pictet-Spengler reaction still on stage. *Curr. Pharm. Des.* (2016) 22(12):1808-50. *Proseguimento nella utilità di una review che tratta i diversi aspetti della reazione di Pictet-Spengler, sia per la sintesi di nuclei tetraidroisochinolinici e tetraidro-β-carbolinici che per la preparazione di strutture complesse contenenti tali nuclei base. Il lavoro è pubblicato su rivista di discreto livello (Q3), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
11. F. Ghirga; D. Quaglio; P. Ghirga; S. Berardozzi; G. Zappia; B. Botta; M. Mori; I. D'Acquarica. The occurrence of enantioselectivity in nature: the case of (S)-norcoclaurine. *Chirality* (2016)

28(3):169-80. *La review ha cercato di fornire un panorama monografico sull'alcaloide (S)-norcoclaurina, mettendo insieme tre diversi punti di vista, quello sintetico, l'analitico e quello biochimico. Il lavoro è pubblicato su rivista di discreto livello (Q3), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*

12. F. Ghirga; D. Quaglio; V. Iovine; B. Botta; M. Pierini, L. Mannina; A. P. Sobolev; F. Ugozzoli; I. D' Acquarica. Synthesis of a Double-Spanned-Resorc[4]arene via Ring-Closing Metathesis and Calculation of Aggregation Propensity. *J. Org. Chem.* (2014) 79(22):11051-60. *I soddisfacenti risultati ottenuti evidenziano l'importanza della Ring-Closing Metathesis (RCM) catalizzata da catalizzatori di Grubbs di seconda generazione nella sintesi di strutture altamente pre-organizzate partendo dallo stereoisomero cono del resorc[4]arene ω -undecenilico. La caratterizzazione del prodotto ottenuto è stata possibile mediante soprattutto analisi cristallografica mediante raggi X e a studi di auto-associazione in soluzione mediante spettroscopia UV-vis. I risultati ottenuti sono soddisfacenti Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La candidata Deborah QUAGLIO presenta alla valutazione una ottima produzione scientifica in considerazione alla sua giovane età. Successivamente ad un'attenta analisi dei lavori svolti in collaborazione ad altri coautori, i contributi scientifici della candidata sono enucleabili e distinguibili e si ritiene che le pubblicazioni possono essere considerate di qualità elevata in relazione al settore concorsuale. Numerose partecipazioni a congresso nelle quali ha contribuito ai lavori presentati dai componenti del gruppo di ricerca e soprattutto presenta 5 comunicazioni orali e 10 comunicazioni poster come autore di riferimento.

È inoltre titolare di 2 brevetti.

Valutazione della produzione complessiva

La candidata Deborah QUAGLIO presenta una produzione scientifica di ottimo livello e per la gran parte pubblicata su riviste ad alto impact factor e con collocazione editoriale nel settore di riferimento alta. L'analisi dei lavori pubblicati permette di delineare una maturità scientifica della candidata da poter ritenere il possesso di competenze specifiche in ambiti di ricerca attinenti alle tematiche richieste nel bando del presente concorso.

COMMISSARIO 3

Prof.ssa Roberta Bernini

TITOLI

1. DOTTORATO DI RICERCA in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università degli di Studi di Roma "La Sapienza" nel 2017.
2. Dottorando Visitatore presso il CERM di Firenze (gennaio 2016 – settembre 2016)
3. Corso OSSSAS - presso l'Università degli di Studi di Roma "La Sapienza" (aprile-giugno 2013)
4. Abilitazione all'esercizio della professione di Farmacista (novembre 2016)
5. Titolarità di assegni di ricerca di tipo B presso l'Università degli di Studi di Roma "La Sapienza" (da dicembre 2016 ad oggi).
6. Partecipazione al progetto di ricerca AIRC (2018 – 2022) - IG#20801 New multi-targeting approaches in Hedgehog-dependent cancers.
7. Partecipazione al PROGETTO DI RICERCA UNIVERSITÀ Sapienza 2017, RM11715C77E550EB – Studio multi-metodologico dei prodotti della filiera agroalimentare della canapa industriale.

8. Titolarità di Fondi di Ricerca PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Sapienza 2016 - Sintesi di analoghi del Glabrescione B e nuove strategie nel drug delivery per la cura del medulloblastoma.
9. Titolarità di Fondi di Ricerca PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Università La Sapienza 2015 – Sintesi di Inibitori della Via Hedgehog per il Trattamento del Medulloblastoma e Studi NMR di Interazione Farmaco /Recettore
10. Partecipazione al progetto di ricerca - PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Università La Sapienza 2014 – Veicolazione Cerebrale di Nuovi Inibitori della Via di Trasduzione del Segnale di Hedgehog.
11. Attività di supporto alla didattica, tutoraggio per studenti laureandi e partecipazione agli esami di profitto per la disciplina “Chimica Organica” del corso di Laurea in Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza” a partire dal 2017.
12. Esercitazioni teoriche in aula per il corso di “Chimica Organica” del corso di Laurea in Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza”
13. Membro ufficiale di Commissione Esaminatrice dal 2019 per la discipline “Chimica Organica”, nominato dal Consiglio di corso di Studio di Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza”
14. Attività di tutoraggio relativa al Progetto di Alternanza Scuola-Lavoro presso Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma.

La Candidata si è laureata in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche nel 2013 presso la Facoltà di Farmacia e Medicina dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza” con la votazione di 110/110 e lode, discutendo la tesi dal titolo “*Sintesi di sistemi pre-organizzati a struttura resorc[4]arenica*”. Presso la stessa sede, nel 2017 ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Farmaceutiche a conclusione di un progetto di Dottorato dal titolo “*NMR Spectroscopy: A versatile tool for the investigation of organic reaction mechanism and metabolomics analysis*”. Da novembre 2016 ad oggi è titolare di assegni di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza” e dal 2014 è titolare di fondi di ricerca. Dal 2017, svolge attività didattica di supporto nell’ambito della disciplina Chimica Organica del Corso di Laurea in Farmacia e Medicina presso l’Università La Sapienza di Roma ed è membro ufficiale della Commissione Esaminatrice degli esami di profitto della medesima disciplina. Nell’ambito del Progetto di Alternanza Scuola-Lavoro, svolge attività di tutoraggio presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco.

I titoli presentati dalla Candidata ed esaminati delineano un profilo formativo e scientifico centrato sulla progettazione e sullo sviluppo di tematiche di ricerca pienamente inerenti al SSD CHIM/06 oggetto della presente procedura selettiva, caratterizzato da continuità temporale e notevole impegno. Per la titolarità di fondi di ricerca, emerge l’avvio, da parte della Candidata, di un percorso di autonomia scientifica. I titoli didattici acquisiti dimostrano conoscenza e specifiche competenze nell’ambito SSD CHIM/06. Complessivamente, il profilo curricolare della Candidata risulta ottimo.

ELENCO PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE SELEZIONATE

1. V. Ghini; D. Quaglio; C. Luchinat; P. Turano. NMR for sample quality assessment in metabolomics. *New Biotechnol.* (2019), 52:25-34. *Il lavoro descrive l'applicazione della tecnica NMR nello studio di matrici biologiche complesse (urine, siero e plasma). I risultati sono soddisfacenti. Il lavoro è congruente con il SSD-CHIM/06 non è pienamente attinente alle tematiche del bando.*
2. D. Quaglio; N. Zhdanovskaya; G. Tobajas; V. Cuartas; S. Balducci; M. S. Christodoulou; G. Fabrizi; M. Gargantilla; E.-M. Priego; Á. C. Pestaña; D. Passarella; I. Screpanti; B. Botta; R. Palermo; M. Mori; F. Ghirga; M.-J. Pérez-Pérez. Chalcones and Chalconemimetic Derivatives as Notch Inhibitors in a Model of T-cell Acute Lymphoblastic Leukemia. *ACS Med. Chem. Lett.* (2019), 10:639-43. *Il lavoro descrive la progettazione, l'identificazione e la sintesi di calconie loro analoghi come nuovi promettenti inibitori della via di trasduzione del segnale di Notch. Le nuove molecole hanno mostrato una buona*

attività inibitoria su linee cellulari di leucemia linfoblastica. I risultati ottenuti sono di ottimo livello. Il lavoro è congruente con il SSD-CHIM/06 e pienamente attinente alle tematiche del bando.

3. D. Quaglio; G. Zappia; E. De Paolis; S. Balducci; B. Botta; F. Ghirga. Olefin metathesis reaction as a locking tool for macrocycle and mechanomolecule construction. *Org. Chem. Front.* (2018), 5:3022-55. *La review descrive la reazione di metatesi olefinica finalizzata alla costruzione di strutture macrocicliche complesse evidenziandone l'importanza e le potenzialità applicative. La review è di ottimo livello. Il lavoro è congruente con il SSD-CHIM/06 ed attinente alle tematiche del bando.*
4. S. Corradi; G. Mazzocanti; F. Ghirga; D. Quaglio; L. Nevola; C. Massera; F. Ugozzoli; G. Giannini; A. Ciogli; I. D'Acquarica. Synthesis of Bromoundecyl Resorc[4]arenes and Applications of the Cone Stereoisomer as Selector for Liquid Chromatography. *J. Org. Chem.* (2018), 83(15):7683-93. *Il lavoro descrive la sintesi di composti macrociclici costituiti da quattro unità di resorcinolo legate tra loro da ponti metinici, come efficienti selettori per la cromatografia liquida ad alte prestazioni di combretastatine naturali e semisintetiche. I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è congruente con il SSD-CHIM/06 ed attinente alle tematiche del bando.*
5. A. Calcaterra; V. Iovine; B. Botta; D. Quaglio; I. D'Acquarica; A. Ciogli; A. Iazzetti; R. Alfonsi; L. Lo spinoso Severini; P. Infante; L. Di Marcotullio; M. Mori; F. Ghirga. Chemical, computational and functional insights into the chemical stability of the Hedgehog pathway inhibitor GANT61. *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* (2018), 33(1):349-58. *Il lavoro, a carattere interdisciplinare, descrive il meccanismo e la cinetica di idrolisi del GANT61, composto antitumorale inibitore della via di segnalazione di Hedgehog, attraverso studi NMR, cromatografici, di modellistica molecolare e saggi biologici su linee cellulari. Di rilievo la messa a punto di una efficiente procedura di sintesi del GANT61 e del suo derivato idrolizzato GANT61-D. I risultati sono soddisfacenti. Il lavoro è congruente con il SSD-CHIM/06 e pienamente attinente alle tematiche del bando.*
6. M. Mori; L. Tottone; D. Quaglio; N. Zhdanovskaya; C. Ingallina; M. Fusto; F. Ghirga; G. Peruzzi; M. E. Crestoni; F. Simeoni; F. Giulimondi; C. Talora; B. Botta; I. Screpanti; R. Palermo. Identification of a novel chalcone derivative that inhibits Notch signaling in T-cell acute lymphoblastic leukemia. *Scientific Reports* (2017), 7(1):2213. *Il lavoro descrive, mediante un approccio chemo-informatico di clusterizzazione di più di 1000 prodotti di origine naturale e sintetica, l'identificazione di una molecola a struttura 1,3-diaril-2-propenoica, potenzialmente in grado di inibire la via di trasduzione del segnale di Notch. Selezionata tale molecola, sono stati progettati e sintetizzati 26 derivati tramite la reazione di condensazione di Claisen-Schmidt, che hanno permesso un aumento di attività biologica, di stabilità, e la delineazione della SAR (relazione struttura attività). I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è congruente con il SSD-CHIM/06 e pienamente attinente alle tematiche del bando.*
7. F. Aiello; F. Balzano; F. Ghirga; I. D'Acquarica; B. Botta; G. Uccello-Barretta; D. Quaglio. First detection of a ruthenium-carbene-resorc[4]arene complex during the progress of a metathesis reaction. *EUR Journal of Organic Chemistry* (2017), 17: 2407-15. *Il lavoro descrive l'identificazione, mediante spettroscopia ad alta risoluzione (600 MHz) ¹H e ³¹P NMR e spettroscopia DOSY, del complesso rutenio-carbene-resorc[4]arene, intermedio chiave della reazione di metatesi olefinica effettuata sul bicyclo-alcene a struttura resorc[4]arenica in conformazione sedia. I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è congruente con il SSD-CHIM/06 ed attinente alle tematiche del bando.*
8. P. Infante; R. Alfonsi; C. Ingallina; D. Quaglio; F. Ghirga; I. D'Acquarica; F. Bernardi; L. Di Magno; G. Canettieri; I. Screpanti; A. Gulino; B. Botta; M. Mori; L. Di Marcotullio. Inhibition of Hedgehog-dependent tumors and cancer stem cells by a newly identified naturally

occurring chemotype. *Cell death & Disease* (2016) 7(9):e2376. *Il lavoro descrive l'identificazione, mediante studi di modellistica molecolare, di 17 molecole potenzialmente attive quali inibitori della via di trasduzione del segnale di Hedgehog e, più nel dettaglio, del recettore Smo. L'identità strutturale dei composti selezionati in silico è stata effettuata mediante spettroscopia NMR e la purezza determinata mediante HPLC in fase inversa. Dagli studi in vitro, un calcone naturale è risultato il più attivo della serie la cui sintesi è stata successivamente ottimizzata per lo svolgimento di successivi studi in vivo. I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è congruente con il SSD-CHIM/06 ed attinente alle tematiche del bando.*

9. I. D'Acquarica; F. Ghirga; D. Quaglio; A. Cerreto; C. Ingallina; A. Tafi; B. Botta. Molecular recognition of natural products by resorc[4]arene receptors. *Curr. Pharm. Des.* (2016) 22(12):1715-29. *La review descrive i diversi approcci sintetici volti alla sintesi dei macrocicli a struttura resorc[4]arenica, quali recettori artificiali nel riconoscimento molecolare di prodotti di origine naturale. La review risulta soddisfacenti. E' congruente con il SSD-CHIM/06 ed attinente alle tematiche del bando.*
10. C. Ingallina; I. D'Acquarica; G. Delle Monache; F. Ghirga; D. Quaglio; P. Ghirga; S. Berardozi; V. Markovic; B. Botta. The Pictet-Spengler reaction still on stage. *Curr. Pharm. Des.* (2016) 22(12):1808-50. *La review descrivi i diversi aspetti della reazione di Pictet-Spengler, sia per la sintesi di nuclei tetraidroisochinolinici e tetraidro- β -carbolinici che per la preparazione di strutture complesse contenenti tali nuclei base. La review risulta soddisfacente. Il lavoro è congruente con il SSD-CHIM/06 ed attinente alle tematiche del bando.*
11. F. Ghirga; D. Quaglio; P. Ghirga; S. Berardozi; G. Zappia; B. Botta; M. Mori; I. D'Acquarica. The occurrence of enantioselectivity in nature: the case of (S)-norcoclaurine. *Chirality* (2016) 28(3):169-80. *La review presenta dal punto di vista sintetico, analitico e biochimico l'alcaloide (S)-norcoclaurina. La review risulta soddisfacente. E' congruente con il SSD-CHIM/06 ma non attinente alle tematiche del bando.*
12. F. Ghirga; D. Quaglio; V. Iovine; B. Botta; M. Pierini, L. Mannina; A. P. Sobolev; F. Ugozzoli; I. D'Acquarica. Synthesis of a Double-Spanned-Resorc[4]arene via Ring-Closing Metathesis and Calculation of Aggregation Propensity. *J. Org. Chem.* (2014) 79(22):11051-60. *Il lavoro descrive l'impiego della reazione di metatesi olefinica, partendo dallo stereoisomero cono del resorc[4]arene ω -undecenilico, per la sintesi di strutture altamente pre-organizzate. Il principale prodotto di RCM è stato sottoposto ad analisi cristallografica mediante raggi X e a studi di auto-associazione in soluzione mediante spettroscopia UV-vis. I risultati ottenuti sono soddisfacenti. Il lavoro è congruente con il SSD-CHIM/06 ed attinente alle tematiche del bando.*

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La produzione scientifica presentata della Candidata da valutare per la presente procedura selettiva consiste di 12 pubblicazioni censite dalla banca dati Scopus ed è caratterizzata dai seguenti indicatori bibliometrici:

Impact Factor totale: 45.6

Impact Factor medio per pubblicazione: 3.8

Numero totale di citazioni: 70

Numero medio di citazioni per prodotto: 5.83

Indice di Hirsch: 5

La Candidata risulta, inoltre, relatore di 5 comunicazioni orali a congresso, 9 comunicazioni poster; coautore di numerose comunicazioni a congresso; titolare di 2 brevetti.

Valutazione della produzione complessiva

La Candidata presenta una produzione scientifica su riviste a diffusione internazionale a elevato impatto caratterizzata da continuità temporale ed indicatori bibliometrici rilevanti. Le pubblicazioni presentate evidenziano ottime competenze specifiche sulle tematiche di ricerca inerenti il SSD CHIM/06 ed attinenti al bando oggetto della presente procedura selettiva.

GIUDIZIO COLLEGALE

TITOLI

1. DOTTORATO DI RICERCA in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" nel 2017.
2. Dottorando Visitatore presso il CERM di Firenze (gennaio 2016 – settembre 2016)
3. Corso OSSSAS - presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (aprile-giugno 2013)
4. Abilitazione all'esercizio della professione di Farmacista (novembre 2016)
5. Titolare di assegni di ricerca di tipo B presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (da dicembre 2016 ad oggi).
6. Partecipazione al progetto di ricerca AIRC (2018 – 2022) - IG#20801 New multi-targeting approaches in Hedgehog-dependent cancers.
7. Partecipazione al PROGETTO DI RICERCA UNIVERSITÀ Sapienza 2017, RM11715C77E550EB – Studio multi-metodologico dei prodotti della filiera agroalimentare della canapa industriale.
8. Titolarità di Fondi di Ricerca PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Sapienza 2016 - Sintesi di analoghi del Glabrescione B e nuove strategie nel drug delivery per la cura del medulloblastoma.
9. Titolarità di Fondi di Ricerca PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Università La Sapienza 2015 – Sintesi di Inibitori della Via Hedgehog per il Trattamento del Medulloblastoma e Studi NMR di Interazione Farmaco /Recettore
10. Partecipazione al progetto di ricerca - PROGETTI PER AVVIO ALLA RICERCA Università La Sapienza 2014 – Veicolazione Cerebrale di Nuovi Inibitori della Via di Trasduzione del Segnale di Hedgehog.
11. Attività di supporto alla didattica, tutoraggio per studenti laureandi e partecipazione agli esami di profitto per la disciplina "Chimica Organica" del corso di Laurea in Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" a partire dal 2017.
12. Esercitazioni teoriche in aula per il corso di "Chimica Organica" del corso di Laurea in Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza"
13. Membro ufficiale di Commissione Esaminatrice dal 2019 per la discipline "Chimica Organica", nominato dal Consiglio di corso di Studio di Farmacia, Facoltà di Farmacia e Medicina dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza"
14. Attività di tutoraggio relativa al Progetto di Alternanza Scuola-Lavoro presso Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma.

Valutazione dei titoli

La Candidata si è laureata in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche nel 2013 presso la Facoltà di Farmacia e Medicina dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con la votazione di 110/110 e lode, discutendo la tesi dal titolo "*Sintesi di sistemi pre-organizzati a struttura resorc[4]arenica*". Presso la stessa sede, nel 2017 ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Farmaceutiche a conclusione di un progetto di Dottorato dal titolo "*NMR Spectroscopy: A versatile tool for the investigation of organic reaction mechanism and metabolomics analysis*". Sotto la supervisione del Prof. Bruno Botta, la Candidata durante il corso di dottorato ha studiato lo sviluppo delle reazioni di metatesi olefinica nella sintesi di ricettori artificiali a struttura molecolare complessa. Durante il dottorato la candidata è stata ospite (dal 13/01/2016 al 30/09/2016) del Centro di Risonanza Magnetiche dell'Università di Firenze e coinvolta in progetti di ricerca nel campo della metabolomica ed ha acquisito familiarità con l'acquisizione di spettri NMR di campioni biologici di origine umana e culture cellulari. Nel corso del suo percorso formativo e professionale, a Dott.ssa Quaglio ha svolto

attività di ricerca pienamente inerente al SSD del concorso ed è stata titolare di fondi di ricerca. Da novembre 2016 ad oggi è titolare di assegni di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" e dal 2014 è titolare di fondi di ricerca. Svolge dal 2017 attività didattica di supporto nell'ambito della disciplina Chimica Organica del Corso di Laurea in Farmacia e Medicina presso l'Università La Sapienza di Roma ed è membro ufficiale della Commissione Esaminatrice degli esami di profitto della medesima disciplina. Nell'ambito del Progetto di Alternanza Scuola-Lavoro, svolge attività di tutoraggio presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco.

I titoli presentati dalla Candidata ed esaminati delineano un profilo formativo e scientifico centrato sulla progettazione e sullo sviluppo di tematiche di ricerca pienamente inerenti al SSD CHIM/06 oggetto della presente procedura selettiva, caratterizzato da continuità temporale e notevole impegno. Per la titolarità di fondi di ricerca, emerge l'avvio, da parte della Candidata, di un percorso di autonomia scientifica. I titoli didattici acquisiti dimostrano conoscenza e specifiche competenze nell'ambito SSD CHIM/06. Complessivamente, il profilo curricolare della Candidata risulta ottimo.

ELENCO PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE SELEZIONATE

1. V. Ghini; D. Quaglio; C. Luchinat; P. Turano. NMR for sample quality assessment in metabolomics. *New Biotechnol.* (2019), 52:25-34. *Il lavoro mostra lo sviluppo degli approcci NMR nella valutazione dell'impatto di differenti pre-trattamenti analitici sulla qualità di campioni biologici dedicati alla metabolomica. Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
2. D. Quaglio; N. Zhdanovskaya; G. Tobajas; V. Cuartas; S. Balducci; M. S. Christodoulou; G. Fabrizi; M. Gargantilla; E.-M. Priego; Á. C. Pestaña; D. Passarella; I. Screpanti; B. Botta; R. Palermo; M. Mori; F. Ghirga; M.-J. Pérez-Pérez. Chalcones and Chalcone-mimetic Derivatives as Notch Inhibitors in a Model of T-cell Acute Lymphoblastic Leukemia. *ACS Med. Chem. Lett.* (2019), 10:639-43. *La progettazione e la identificazione di un numero di calconi e composti calconi mimetici hanno permesso di sintetizzare dei nuovi promettenti inibitori della via di trasduzione del segnale di Notch. Il lavoro è pubblicato su rivista di buono livello (Q2), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
3. D. Quaglio; G. Zappia; E. De Paolis; S. Balducci; B. Botta; F. Ghirga. Olefin metathesis reaction as a locking tool for macrocycle and mechanomolecule construction. *Org. Chem. Front.* (2018), 5:3022-55. *La review mette in evidenza l'importanza della reazione di metatesi di olefine e tiene conto di diverse strategie sintetiche che coinvolgono tale procedura evidenziandone la crescente utilità e il potenziale futuro nella sintesi di macchine molecolari. Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
4. S. Corradi; G. Mazzocanti; F. Ghirga; D. Quaglio; L. Nevola; C. Massera; F. Ugozzoli; G. Giannini; A. Ciogli; I. D'Acquarica. Synthesis of Bromoundecyl Resorc[4]arenes and Applications of the Cone Stereoisomer as Selector for Liquid Chromatography. *J. Org. Chem.* (2018), 83(15):7683-93. *Nel proseguire lo studio sulle proprietà dei resorc[4]areni C-alchilati, la ricerca ha messo come derivati contenenti catene bromoundecanoliche, possono comportarsi da efficienti selettori per la cromatografia liquida ad alte prestazioni di combretastatine naturali e semisintetiche. Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
5. A. Calcaterra; V. Iovine; B. Botta; D. Quaglio; I. D'Acquarica; A. Ciogli; A. Iazzetti; R. Alfonsi; L. Lo spinoso Severini; P. Infante; L. Di Marcotullio; M. Mori; F. Ghirga. Chemical, computational and functional insights into the chemical stability of the Hedgehog pathway inhibitor GANT61. *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry* (2018), 33(1):349-58. *I risultati ottenuti hanno evidenziato l'importanza dell'interdisciplinarietà nel chiarire il meccanismo e la cinetica di idrolisi del GANT61, composto antitumorale inibitore della via di*

segnalazione di Hedgehog. Studi di spettroscopia NMR, cromatografici, di modellistica molecolare e saggi funzionali su linee cellulari hanno permesso di arrivare ad un efficiente protocollo sintetico del GANT61 e del suo derivato idrolizzato GANT61-D. Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.

6. M. Mori; L. Tottone; D. Quaglio; N. Zhdanovskaya; C. Ingallina; M. Fusto; F. Ghirga; G. Peruzzi; M. E. Crestoni; F. Simeoni; F. Giulimondi; C. Talora; B. Botta; I. Screpanti; R. Palermo. Identification of a novel chalcone derivative that inhibits Notch signaling in T-cell acute lymphoblastic leukemia. *Scientific Reports* (2017), 7(1):2213. *Attraverso un importante approccio chemo-informatico di clusterizzazione di più di 1000 molecole organiche naturali e sintetiche, è stata possibile l'identificazione di una molecola a struttura 1,3-diaril-2-propenoica, potenzialmente in grado di inibire la via di trasduzione del segnale di Notch. Da questa, mediante la reazione di condensazione di Claisen-Schmidt, sono stati sintetizzati 26 suoi derivati che hanno permesso un aumento di attività biologica, di stabilità, e la delineazione della SAR (relazione struttura attività). Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
7. F. Aiello; F. Balzano; F. Ghirga; I. D'Acquarica; B. Botta; G. Uccello-Barretta; D. Quaglio. First detection of a ruthenium-carbene-resorc[4]arene complex during the progress of a metathesis reaction. *EUR Journal of Organic Chemistry* (2017), 17: 2407-15. *Per la prima volta, mediante spettroscopia ad alta risoluzione (600 MHz) ¹H e ³¹P NMR e spettroscopia DOSY, è stata descritta la struttura di un complesso rutenio-carbene-resorc[4]arene. Tale complesso rappresenta l'intermedio chiave della reazione di metatesi olefinica effettuata sul bicicloalchene a struttura resorc[4]arenica in conformazione sedia, dimostrando il meccanismo di RCM-CM su tali macrocicli. Il lavoro è pubblicato su rivista di buono livello (Q2), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
8. P. Infante; R. Alfonsi; C. Ingallina; D. Quaglio; F. Ghirga; I. D'Acquarica; F. Bernardi; L. Di Magno; G. Canettieri; I. Screpanti; A. Gulino; B. Botta; M. Mori; L. Di Marcotullio. Inhibition of Hedgehog-dependent tumors and cancer stem cells by a newly identified naturally occurring chemotype. *Cell death & Disease* (2016) 7(9):2376. *Si è potuto mettere in evidenza come inibitori di Hedgehog sono degli validi sistemi nel trattamento di un'ampio range di tumori. L'identità strutturale dei composti selezionati in silico è stata effettuata mediante spettroscopia NMR e la purezza determinata mediante HPLC in fase inversa. Dai i primi studi in vitro, un calcone naturale penta-OMe è risultato il più attivo della serie e la sua sintesi chimica è stata possibile sfruttando una condensazione di Claisen-Schmidt. L'ottimizzazione della procedura sintetica permette di ottenere sufficienti quantità della molecola target per successivi studi in vivo. Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
9. I. D'Acquarica; F. Ghirga; D. Quaglio; A. Cerreto; C. Ingallina; A. Tafi; B. Botta. Molecular recognition of natural products by resorc[4]arene receptors. *Curr. Pharm. Des.* (2016) 22(12):1715-29. *E' stata scritta una review sugli attuali diversi approcci sintetici per la sintesi dei macrocicli a struttura resorc[4]arenica, da poter utilizzare come recettori artificiali nel riconoscimento molecolare di prodotti di origine naturale. Il lavoro è pubblicato su rivista di discreto livello (Q3), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*
10. C. Ingallina; I. D'Acquarica; G. Delle Monache; F. Ghirga; D. Quaglio; P. Ghirga; S. Berardozi; V. Markovic; B. Botta. The Pictet-Spengler reaction still on stage. *Curr. Pharm. Des.* (2016) 22(12):1808-50. *Proseguimento nella utilità di una review che tratta i diversi aspetti della reazione di Pictet-Spengler, sia per la sintesi di nuclei tetraidroisochinolinici e tetraidro-β-carbolinici che per la preparazione di strutture complesse contenenti tali nuclei base. Il lavoro è pubblicato su rivista di discreto livello (Q3), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*

11. F. Ghirga; D. Quaglio; P. Ghirga; S. Berardozzi; G. Zappia; B. Botta; M. Mori; I. D'Acquarica. The occurrence of enantioselectivity in nature: the case of (S)-norcoclaurine. Chirality (2016) 28(3):169-80. *La review ha cercato di fornire un panorama monografico sull'alcaloide (S)-norcoclaurina, mettendo insieme tre diversi punti di vista, quello sintetico, l'analitico e quello biochimico. Il lavoro è pubblicato su rivista di discreto livello (Q3), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*

12. F. Ghirga; D. Quaglio; V. Iovine; B. Botta; M. Pierini, L. Mannina; A. P. Sobolev; F. Ugozzoli; I. D'Acquarica. Synthesis of a Double-Spanned-Resorc[4]arene via Ring-Closing Metathesis and Calculation of Aggregation Propensity. J. Org. Chem. (2014) 79(22):11051-60. *I soddisfacenti risultati ottenuti evidenziano l'importanza della Ring-Closing Metathesis (RCM) catalizzata da catalizzatori di Grubbs di seconda generazione nella sintesi di strutture altamente pre-organizzate partendo dallo stereoisomero cono del resorc[4]arene ω -undecenilico. La caratterizzazione del prodotto ottenuto è stata possibile mediante soprattutto analisi cristallografica mediante raggi X e a studi di auto-associazione in soluzione mediante spettroscopia UV-vis. I risultati ottenuti sono soddisfacenti Il lavoro è pubblicato su rivista di elevato livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/06 e su tematiche attinenti al bando.*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Valutazione della produzione complessiva

La produzione scientifica presentata della Candidata da valutare per la presente procedura selettiva consiste di 12 pubblicazioni censite dalla banca dati Scopus ed è caratterizzata dai seguenti indicatori bibliometrici:

Impact Factor totale: 45.6

Impact Factor medio per pubblicazione: 3.8

Numero totale di citazioni: 70

Numero medio di citazioni per prodotto: 5.83

Indice di Hirsch: 5

La Candidata risulta, inoltre, relatrice di 5 comunicazioni orali a congresso, 9 comunicazioni poster, coautrice di numerose comunicazioni a congresso e titolare di 2 brevetti.

La Candidata QUAGLIO presenta una notevole produzione scientifica e continua nel tempo per la gran parte su riviste a diffusione internazionale dotate di ottima collocazione editoriale ad alto impact factor. Le pubblicazioni presentate evidenziano ottime competenze specifiche sulle tematiche di ricerca inerenti il SSD CHIM/06 ed attinenti al bando oggetto della presente procedura selettiva. L'analisi dei lavori pubblicati permette di delineare una maturità scientifica della candidata da poter ritenere il possesso di competenze specifiche in ambiti di ricerca attinenti alle tematiche richieste nel bando del presente concorso.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 17:00.

Letto, approvato e sottoscritto.

La Commissione

Prof. Giancarlo Fabrizi - Presidente

Prof. Enrico Marcantoni - Componente

Prof.ssa Roberta Bernini - Segretario