

INFORMAZIONI PERSONALI

Sabatino Manuela



COMPETENZE PERSONALI

09/2019-09/2020

Post-Doc, Assegno di Ricerca, tipo B

"Sapienza", Università di Roma, Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Roma (Italia) L'ambito in cui il Progetto si sta svolgendo è "Design razionale di nuovi potenziali composti farmaceutici mediante l'applicazione di approcci computazionali e tecniche di machine learning."

Post-Doc, Assegno di Ricerca, tipo B

"Sapienza", Università di Roma, Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Roma (Italia) L'ambito in cui il Progetto si sta svolgendo è "Sviluppo di modelli predittivi con tecniche chemiometriche (QSAR, 3-D QSAR e COMBINE) per la selezione di nuovi potenziali agenti epigenetici."

12/2018-08/2019

Senior Scientist presso Alchemical Dynamics s.r.l.

Consulenza scientifica presso IRBM Science Park, Pomezia.

Applicazione delle principali tecniche di bioinformatica, chimica computazionale e

10/2014–12/2018
(un anno di congelamento)

Internato di Ricerca

RCMD (Rome Center for Molecular Design), Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, "Sapienza" Università degli Studi di Roma, Roma (Italia)

Individuazione, progettazione e sviluppo di nuove potenziali molecole bioattive mediante tecniche di Computational Chemistry.

03/2018–04/2018

Visiting PhD Student

Università Degli Studi di Padova, presso il laboratorio diretto dalla Prof.ssa Rosa Diliddo, Padova (Italia)

Apprendimento e applicazione di tecniche di Biologia molecolare ampiamente utilizzate in ambito biologico.

03/2017–06/2017

Visiting PhD Student

Università degli studi di Milano Bicocca, presso il laboratorio diretto dal Prof. Roberto Todeschini, Milano (Italia)

Approfondimento di tecniche chemometriche ampiamente utilizzate in ambito chimico-computazionale.

11/2014–11/2015

Assegno di Ricerca, tipo B

"Sapienza" Università di Roma, Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Roma (Italia)

Le attività sono state svolte in seno al progetto: "Sviluppo di modelli QSAR, 3-D QSAR e COMBINE per la progettazione razionale di nuovi potenziali antitumorali"

04/2014–10/2014

Borsa di Studio

"Sapienza", Università Degli Studi di Roma, Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Roma (Italia)

L'ambito in cui il Progetto è stato svolto è stato "Sistemi Naturali e Sintetici ad Attività Antitumorale"

01/2012–10/2013

Internato Di Tesi Sperimentale Magistrale

RCMD (Rome Center for Molecular Design), Dipartimento di Chimica e Tecnologie del

Farmaco, "Sapienza" Università degli Studi di Roma, Roma (Italia)

- 10/2011–01/2012 **Internato di Tesi Sperimentale Triennale**
RCMD (Rome Center for Molecular Design), Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, "Sapienza" Università degli Studi di Roma, Roma (Italia)
- 10/2014–12/2018 **Assistenza alle esercitazioni e agli esami di fine trimestre di chimica farmaceutica per l'insegnamento "Progettazione e Biotecnologie Farmaceutiche"**
Corso di Laurea Magistrale in Biotecnologie Farmaceutiche, Prof.Rino Ragno, Facoltà di Farmacia e Medicina, "Sapienza" Università degli Studi di Roma
- 10/2014–12/2018 **Assistenza alle esercitazioni e agli esami di fine trimestre di chimica farmaceutica per l'insegnamento "Chimica Farmaceutiche e Tecnologie del Farmaco"**
Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie, Prof.Rino Ragno, Facoltà di Farmacia e Medicina, "Sapienza" Università degli Studi di Roma
- 10/2014–12/2018 **Attività di referaggio per le riviste "Natural Product Research" e "Journal of Advanced Research in Biotechnology"**

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

- 12/2018 **Dottorato in Scienze Farmaceutica**
"Sapienza" Università degli Studi di Roma (Italia)
Titolo della Tesi: "Rational Design of Potential novel Pharmaceutical Compounds Through Computational Approaches and Machine Learning Techniques"
Tutor: Prof. Rino Ragno
Principali tematiche oggetto della tesi:
 - Machine Learning
 - Simulazione di Docking Molecolare
 - QSAR e 3-D QSAR
 - Tecniche di estrazione di sostanze di origine naturale
- 10/2013 **Laurea Magistrale in Biotecnologie Farmaceutiche**
"Sapienza" Università degli Studi di Roma (Italia)
Titolo della tesi: "Sviluppo di un protocollo per la generazione automatica di modelli 3-D QSAR."
Relatore: Prof. Rino Ragno
Votazione: 110/110 con Lode
Principali Tematiche oggetto della tesi:
 - Sovrapposizione Molecolare Ligand-Based e Structure-Based
 - Sviluppo di Modelli 3-D QSAR
 - Sviluppo di protocollo in linguaggio Python
- 01/2012 **Laurea Triennale in Biotecnologie**
"Sapienza" Università degli Studi di Roma (Italia)
Titolo della Tesi: "Applicazione della metodica 3-D QSAR"
Relatore: Prof. Rino Ragno
Votazione: 103/110
Principali Tematiche oggetto della tesi:
 - Sviluppo di modelli 3-D QSAR

COMPETENZE PERSONALI

Lingua madre italiano

Lingue straniere

inglese

COMPRESIONE		PARLATO		PRODUZIONE SCRITTA
Ascolto	Lettura	Interazione	Produzione orale	
B1	B1	B1	B1	B1

Livelli: A1 e A2: Utente base - B1 e B2: Utente autonomo - C1 e C2: Utente avanzato
 Quadro Comune Europeo di Riferimento delle Lingue

Competenze comunicative

- Buona capacità comunicativa acquisite grazie a Lab-meeting periodici e seminari dipartimentali.

Competenze organizzative e gestionali

- Buona capacità organizzativa acquisita durante il periodo di Dottorato in cui veniva richiesto dal Supervisor di organizzare e monitorare il lavoro di studenti, tesisti e tirocinanti.

Competenze professionali

- Simulazione di Docking Molecolare;
 - Software utili alla creazione di modelli farmacoforici;
 - Software utili alla sovrapposizione molecolare ligand-based e structure-based;
 - Editor per la rappresentazione bidimensionale e tridimensionali delle molecole;
 - Software di analisi e visualizzazione grafica di strutture molecolari;
 - Three-Dimensional Quantitative Structure Activity Relationship (3-D QSAR);
 - Quantitative Structure Activity Relationship (QSAR);
 - Quantitative composition Activity Relationship (QCAR);
 - Machine Learning:
 - Modelli di classificazione;
 - Modelli di regressione
 - Analisi delle Componenti Principali (PCA);
 - Programmazione in linguaggio Python;
 - Studio di miscele complesse di origine naturale mediante algoritmi di machine learning;
- Ottima padronanza delle tecniche utili all'estrazione di sostanze naturali da diverse tipologie di droghe:
- Estrazione a corrente di vapore;
 - Estrazione in idrodistillazione;
 - Soxhlet;
- Ottima padronanza delle principali tecniche utilizzate nella Biologia molecolare:
- Quantificazione di Acidi Nucleici;
 - PCR;
 - Western Blot;

Competenze informatiche

- Ottima padronanza del sistema operativo Linux;
- Ottima padronanza del sistema operativo Windows;
- Ottima padronanza degli strumenti di Microsoft Office;
- Ottima padronanza degli strumenti di Libreoffice;
- Linguaggio di programmazione Python;

Patente di guida

B

CONFERENZE E SEMINARI

“22st EuroQSAR, Traslational and Healt Informatics Implication for Drug Design”

16-20/09/2018, Salonicco, Grecia

“MedChemSicily2018”

17-20/07/2018, Palermo, Italia

“VIII Biology and Molecular Medicine (BeMM)) PhD School Symposium”

Partecipazione con intervento

20/11/2017, Roma, Italia

“11st European Workshop in Drug Design and Mu.Ta.Lig Traingin School”

21-26/05/2017, Certosa di Pontignano (SI), Italia

“21st EuroQSAR, European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationship”

4-8/09/2016, Verona, Italia

Scuola di Chemometria

15-19/06/2018, Genova, Italia

“Chromatic, epigenome & Drug discovery: training school”

21-23/03/2016, Napoli, Italia

III Congresso Nazionale di Chimica Teorica e Computazionale della Società di Chimica

Partecipazione con intervento: “Molecular Docking, 3-DQSAR and COMBINE application to development of predictive models in the DOT1L case”

14-16/12/2015, Roma, Italia

Finanziamento di Ateneo per la Ricerca 2017

Titolo progetto: "Disruptor of telomeric Silencing 1-Like (DOT1L): identificazione di una nuova classe di inibitori non nucleosidici mediante approcci ligand-based e structure-based"

Finanziamento di Ateneo per la Ricerca 2015

Titolo progetto: "QSAlign: un valido protocollo per la Generazione Automatica di sovrapposizioni molecolari utili per lo sviluppo e l'individuazione di Modelli 3-D QSAR ottimali"

Essential oils biofilm modulation activity, chemical and machine analysis. Application on staphylococcus aureus isolates from cystic fibrosis patients.

Papa R., Garzoli S, Vrenna G, **Sabatino M**, Sapienza F, Relucenti F, Donfrancesco O, Fiscarelli EV, Artini M, Selan L, Ragno R. International Journal of Molecular Sciences, 2020, 21(23), pp. 1–20, 9258

Antimicrobial essential oils formulation: Chitosan coated nanoemulsions for nose to brain delivery.

Rinaldi F, Oliva A, **Sabatino M**, Imbriano A, Hanieh PN, Garzoli S, Mastroianni CM, De Angelis M, Miele MC, Arnaut M, Di Timoteo F, Marianecchi C, Ragno R, Carafa M. *Pharmaceutics*. 2020;12(7):678.

Discovery of the first human arylsulfatase A reversible inhibitor impairing mouse oocyte fertilization

Caroselli S.; Zwergel C.; Pirolli A.; **Sabatino M.**; Xu Z.; Kirsch G.; Mai A.; Colotti G.; Altieri F.; Canipari R.; Valente S.; Ragno R.; *ACS Chem Biol*, 2020.

Experimental Data Based Machine Learning Classification Models with Predictive Ability to Select in Vitro Active Antiviral and Non-Toxic Essential Oils.

Sabatino M, Fabiani M, Božović M, Garzoli S, Antonini L, Marcocci ME, Palamara AT, De Chiara G, Ragno R. *Molecules*. 2020 ;25(10):2452.

Identification of Inhibitors to *Trypanosoma cruzi* Sirtuins Based on Compounds Developed to Human Enzymes.

Matutino Bastos T, Botelho Pereira Soares M, Haddad Franco C, Alcântara L, Antonini L, **Sabatino M**, Mautone N, Holanda Freitas-Junior L, Moraes CB, Ragno R, Rotili D, Schenkman S, Mai A, Silvio Moretti N. *Int J Mol Sci*. 2020 (10):3659.

Potent In Vitro Activity of *Citrus aurantium* Essential Oil and *Vitis vinifera* Hydrolate Against Gut Yeast Isolates from Irritable Bowel Syndrome Patients-The Right Mix for Potential Therapeutic Use.

Di Vito M, Bellardi MG, Sanguinetti M, Mondello F, Girolamo A, Barbanti L, Garzoli S, **Sabatino M**, Ragno R, Vitali A, Palucci I, Posteraro B, Gasbarrini A, Prati GM, Aragona G, Mattarelli P, Bugli F. *Nutrients*. 2020;12(5):1329.

Dissecting the role of novel EZH2 inhibitors in primary glioblastoma cell cultures: Effects on proliferation, epithelial-mesenchymal transition, migration, and on the pro-inflammatory phenotype.

Stazi G.; Taglieri L.; Nicolai A.; Romanelli A.; Fioravanti R.; Morrone S.; **Sabatino M.**; Ragno R.; Taurone S.; Nebbioso M.; Carletti R.; Artico M.; Valente S.; Scarpa S.; Mai A.; *Clin Epigenetics*. 2019 11(1):p.173

Machine Learning Analyses on Data including Essential Oil Chemical Composition and In Vitro Experimental Antibiofilm Activities against Staphylococcus Species

Patsilinakos, A.; Artini M.; **Sabatino, M.**; Bozovic M; Garzoli, S.; Vrenna, G.; Buzzi R; Manfredini S; Selan L; Ragno, R; *Molecules* 2019, 24, 890

Chemical composition and antimicrobial activity of essential oil of *Helichrysum italicum* (Roth) G. Don fil. (Asteraceae) from Montenegro

Oliva A.; Garzoli S.; Sabatino M.; Tadic V.; Costantini S.; Ragno R.; Bozovic M.; *Nat Prod Res* 2019, 19, 30-34

Antimicrobial and antibiofilm activity and machine learning classification analysis of essential oils from different mediterranean Plants against *Pseudomonas aeruginosa*

Artini, M.; Patsilinakos, A.; Papa, R.; Bozovic, M.; **Sabatino, M.**; Garzoli, S.; Vrenna, G.; Tilotta, M.; Pepi, F.; Ragno, R.; Selan, L; *Molecules* 2018, 23, 482

Disruptor of telomeric silencing 1-like (DOT1L): disclosing a new class of non nucleoside inhibitors by means of ligand-based and structure-based approaches

Sabatino, M.; Rotili, D.; Patsilnakos, A.; Forgione, M.; Tomaselli, D.; Alby, F.; Arimondo, P.B.; Mai, A.; Ragno, R.; JCAMD 2018, 32, 435-458

Synthesis, biological evaluation and quantitative structure-active relationships of 1,3-thiazolidin-4-one derivatives. A promising chemical scaffold endowed with high antifungal potency and low cytotoxicity

Carradori, S.; Bizzarri, B.; D'Ascenzio, M.; De Monte, C.; Grande, R.; Rivanera, D.; Zicari, A.; Mari, E.; **Sabatino, M.**; Patsilnakos, A.; Ragno, R.; Eur J Med Chem 2017, 140, 274-292

Composition of the Essential Oil of *Coristospermum cuneifolium* and Antimicrobial Activity Evaluation

Venditti, A.; Frezza, C.; Salutari, G.; di Cecco, M.; Ciaschetti, G.; Oliva, A.; De Angelis, M.; Vullo, V.; **Sabatino, M.**; Garzoli, S.; Pepi, F.; Ragno, R.; Serafini, M.; Bianco, A.; PMIO 2017, 4, e74-e81

Essential Oil Extraction, Chemical Analysis and Anti-Candida Activity of *Foeniculum vulgare* Miller – New Approaches

Garzoli, S.; Bozovic, M.; Baldisserotto, A.; **Sabatino, M.**; Cesa, S.; Mai, A.; Pepi, F.; Manfredini, S.; Ragno, R.; Natural Product Research. 2017:1-67

Essential Oil Extraction, Chemical Analysis and Anti-Candida Activity of *Calamintha nepeta* (L.) Savi subsp *glandulosa* (Req.) Ball-New Approaches

Bozovic, M.; Garzoli, S.; **Sabatino, M.**; Pepi, F.; Baldisserotto, A.; Andreotti, E.; Romagnoli, C.; Mai, A.; Manfredini, S.; Ragno, R.; Molecules 2017, 22.

Understanding the Molecular Determinant of Reversible Human Monoamine Oxidase B Inhibitors Containing 2H-Chromen-2-One Core: Structure-Based and Ligand-Based Derived Three-Dimensional Quantitative Structure Activity Relationships Predictive Models

Mladenovic, M.; Patsilnakos, A.; Pirolo, A.; **Sabatino, M.**; Ragno, R.; Journal of Chemical Information and Modeling 2017, 57, 787-814

New Inhibitors of Indoleamine 2,3-Dioxygenase 1: Molecular Modeling Studies, Synthesis, and Biological Evaluation

Coluccia, A.; Passacantilli, S.; Famigliani, V.; **Sabatino, M.**; Patsilnakos, A.; Ragno, R.; Mazzoccoli, C.; Sisinni, L.; Okuno, A.; Takikawa, O.; Silvestri, R.; La Regina, G.; Journal of Medicinal Chemistry 2016, 59, 9760-9773.

A Series of COX-2 Inhibitors Endowed with NO-Releasing Properties: Synthesis, Biological Evaluation, and Docking Analysis

Consalvi, S.; Poce, G.; Ragno, R.; **Sabatino, M.**; La Motta, C.; Sartini, S.; Calderone, V.; Martelli, A.; Ghelardini, C.; Mannelli, L. D.; Biava, M.; Chemmedchem 2016, 11, 1804-1811

Synthesis, biological evaluation and docking analysis of a new series of methylsulfonyl and sulfamoyl acetamides and ethyl acetates as potent COX-2 inhibitors

Consalvi, S.; Alfonso, S.; Di Capua, A.; Poce, G.; Pirolli, A.; **Sabatino, M.**; Ragno, R.; Anzini, M.; Sartini, S.; La Motta, C.; Mannelli, L. D.; Ghelardini, C.; Biava, M.; Bioorgan Med Chem 2015, 23, 810-820

Poster

Ligand-based virtual screening of BCL-2 inhibitors using an ensemble of machine learning algorithms

A. Patsilnakos, Y. Carta, **M. Sabatino**, L. Antonini, R. Ragno.

22nd EuroQSAR, Translational and Health Informatics Implication for Drug Design, 2018, Salonicco, Grecia

Ligand-based virtual screening of Bcl-2 inhibitors using advanced Machine Learning algorithm

A. Patsilnakos, Y. Carta, **M. Sabatino**, R. Ragno

II Workshop sulla Ricerca, 2018, Roma, Italia

The future is bright. The future is nature and virtual

M. Sabatino, A. Patsilinakos, R. Ragno
II Workshop sulla Ricerca, 2018, Roma, Italia

Teaching and learning computational drug design. Three-dimensional quantitative structure-activity relationships (3-D QSARs) through web applications

A. Patsilinakos, **M. Sabatino**, M. Di Maio, V. Esposito, S. Masiello, M. Viscovio, R. Ragno
II Workshop sulla Ricerca, 2018, Roma, Italia

<http://www.3d-qsar.com>, a Series of Web Application that bring 3-D QSAR methodology to all Desktop and Mobile Devices. A focus on Alignment procedures

M. Sabatino, A. Patsilinakos, A. Ragno, R. Ragno,
11st European Workshop in Drug Design and Mu.Ta.Lig Traingin School, 2017, Certosa di Pontignano (Siena), Italia

Disruptor of telomeric silencing 1 like (DOT1L), development of three-dimensional quantitative structure-activity relationship through ligand-based and structured based approaches

M. Sabatino, A. Patsilinakos and Rino Ragno
21st EuroQSAR, European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationship, 2015, Verona, Italia

Py_Qsalign, a new methods for semi-automatic molecular alignment

M. Sabatino, E. Menicacci, ND. Capocchiano, R. Ragno
I Workshop sulla Ricerca 2015, Roma, Italia

2-D/3-D QSAR modeling of 1,3-thiazolidin-4-one derivatives as potential antifungal agents.

A. Patsilinakos, A. Pirolli, **M. Sabatino**, C. De Monte, S. Carradori, R. Ragno
Computationally Driven Drug Discovery 3rd Meeting, 2014, Verona, Italia

Automatic generation of 3-D QSAR models: a quasi – sistematic approach

M. Sabatino, A. Pirolli, A. Patsilinakos, F. Ballante and R. Ragno
XXII National Meeting on Medicinal Chemistry, 2013, Roma, Italia