

Indirizzo: Università de L'Aquila  
Via Vetoio (Coppito 1)  
67010 Coppito (AQ)  
Italia

Nazionalità: Italiana, Finlandese  
Email: isabella.daidone@univaq.it

## Impiego attuale

Dal 29 Maggio 2015\* **Professore Associato (CHIM03)**  
Sede: Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche, Università de L'Aquila, Italia.

\*nei periodi 23 Nov. 2012 - 22 Apr. 2013 e 15 Feb. 2015 - 14 Lug. 2015 è in congedo di maternità

## Formazione

Ottobre 2004 **Dottorato in Scienze Chimiche** (XVII ciclo)  
Sede: Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"  
Titolo della tesi: *Study of folding and misfolding processes by the use of computational methods.*  
Supervisore: Prof. Alfredo Di Nola.

Maggio 2001 **Laurea in Chimica** (indirizzo: chimica-fisica)  
Sede: Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"  
Titolo della tesi: *Simulazioni di dinamica molecolare del citocromo c*  
Supervisore: Prof. Alfredo Di Nola  
Votazione: 110/110 e Lode.

Luglio 1993 **Diploma di Maturità Scientifica** (sperimentazione Piano Nazionale Informatica)  
Sede: liceo statale "G.B. Morgagni", Roma, Italia  
Votazione: 60/60.

## Ulteriori esperienze lavorative

Gen. 2009 - 28 Mag. 2015 **Ricercatrice a tempo indeterminato (CHIM03)**  
Sede: Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche, Università de L'Aquila, Italia.

Giugno 2007- Dic. 2008 **Borsa post dottorato (Individual Marie Curie Fellowship)**  
Sede: laboratorio "Computational Molecular Biophysics Group" del Prof. Jeremy C. Smith, IWR, Uni Heidelberg, Germania.

Giugno 2005 - Maggio 2007 **Borsa post dottorato**  
Sede: laboratorio "Computational Molecular Biophysics Group" del Prof. Jeremy C. Smith, IWR, Uni Heidelberg, Germania.

Nov. 2004 - Maggio 2005 **Contratto di collaborazione** presso il "Laboratorio di chimica-fisica teorica e computazionale" del Prof. Alfredo Di Nola, dipartimento di

Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza".

- Dal Giugno 2007 Collaborazione con la Dr.ssa Sylvia McLain presso lo "Spallation Neutron Source" e il "Center for Molecular Biophysics", Oak Ridge National Laboratory - ORNL, Tennessee, USA.
- Dal Luglio 2006 Collaborazione con il gruppo "Applied Laserphysics & Laserspectroscopy" del Prof. Markus Sauer, dipartimento di Fisica, Università di Bielefeld, Germania.
- Luglio 2003 Collaborazione con il Dr. Steven Hayward alla "School of Computing Sciences", Università della East Anglia, Norwich, Gran Bretagna.
- Gen. 2000 – Maggio 2005 Attività di ricerca presso il "Laboratorio di chimica-fisica teorica e computazionale" del Prof. Alfredo Di Nola, dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza", durante la quale acquisisce competenze sia nell'ambito della chimica computazionale che in quello dell'informatica.
- Collaborazione con il Dr. Giorgio Colombo, "Istituto di Chimica del Riconoscimento Molecolare" - CNR, Milano, Italia, e con il Prof. Ehud Gazit, dipartimento "Molecular Microbiology and Biotechnology", Università di Tel Aviv, Israele.
- Gen. 1997 – Dic. 2000 Borsa di collaborazione presso la biblioteca del dipartimento di Chimica "G. Illuminati" - Università degli studi di Roma "La Sapienza" .

### **Altre attività**

- 8-19 Luglio 2002 Partecipazione alla "11<sup>a</sup> Scuola Estiva di calcolo parallelo", CINECA, Casalecchio di Reno(BO), Italia.
- Gen. 2001 – Aprile 2001 Partecipazione al corso dal titolo: "Gerarchia di modelli per la simulazione del mondo reale", tenuto dal Prof. H.J.C. Berendsen dell'Università di Groningen, Olanda.

### **Attività didattica**

- Anni accad. 20015-2018 Tiene il corso di "Esercitazioni di Preparazioni Chimiche" (7 CFU) per la laurea triennale in Chimica presso il dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche dell'Università de L'Aquila.
- Anni accad. 2008-2018 Tiene il corso di "Metodi Computazionali" (6 CFU) per la laurea triennale in Chimica presso il dipartimento di Chimica dell'Università de L'Aquila.
- Anni accad. 20015-2017 Tiene il corso di "Chimica Teorica" (6 CFU) per la laurea magistrale in Scienze Chimiche presso il dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche dell'Università de L'Aquila.
- Anni accad. 2008-2012 Tiene il corso di "Chimica Inorganica Superiore" (9 CFU) per la laurea magistrale in Scienze Chimiche presso il dipartimento di Chimica

dell'Università de L'Aquila.

12 Ottobre 2007      Tiene una lezione dal titolo "*Protein folding in silico*" nell'ambito del corso "*BioNoCo – Biocatalysis using non-conventional media*" presso l'istituto di ricerca di Jülich – Forschungszentrum Jülich GmbH (Germania) .

Anni accad. 2006-2008      Tiene il corso di "*Introduction to (bio)-molecular modeling and simulation*" in qualità di **lecturer** presso l'Università di Heidelberg (Germania).

Anno accad. 2003/2004      Svolge attività didattica in qualità di **esercitatore** al MASTER in "*Bioinformatica: applicazioni biomediche e farmaceutiche*", istituito presso il Dipartimento di Scienze Biochimiche "A. Rossi Fanelli" dell'Università di Roma "La Sapienza".

Svolge attività didattica in qualità di **tutor** per il corso di "*Calcolo*" tenuto dalla Prof. Ada Ardito (corso di laurea in Chimica – Università degli studi di Roma "La Sapienza").

Anno accad. 2002/2003      Collabora al corso di "*Chimica computazionale*" tenuto dal Prof. Nico Sanna (corso di laurea in Chimica – Università degli studi di Roma "La Sapienza").

Collabora al corso di "*Elementi di informatica chimica*" tenuto dal Prof. Alfredo Di Nola (corso di laurea in Chimica – Università degli studi di Roma "La Sapienza").

Svolge attività didattica in qualità di **esercitatore** al MASTER in "*Bioinformatica: applicazioni biomediche e farmaceutiche*", istituito presso il Dipartimento di Scienze Biochimiche "A. Rossi Fanelli" dell'Università di Roma "La Sapienza".

## Supervisione studenti

Nov. 2017 – presente      Segue Akash Deep Biswas nel lavoro di tesi per il dottorato "Methods and Models for Molecular Sciences", Scuola Normale Superiore di Pisa.

Giugno 2017 - Dic. 2017      Segue Noemi Labbate nel lavoro di tesi di laurea triennale in Chimica presso L' Università de L'Aquila.

Giugno 2016 - Dic. 2016      Segue Mattia Colalongo nel lavoro di tesi di laurea triennale in Chimica presso L' Università de L'Aquila.

Giugno 2016 - Dic. 2016      Segue Valerio Mazzilli nel lavoro di tesi di laurea triennale in Chimica presso L' Università de L'Aquila.

Sett. 2011 – Luglio 2012      Segue Giuseppe Guarracino nel lavoro di tesi di laurea triennale in Chimica presso L' Università de L'Aquila.

Marzo 2011 – Marzo 2012      Segue Andrea Le Donne nel lavoro di tesi di laurea triennale in Chimica presso L' Università de L'Aquila.

- Ottobre 2009 – Segue Claudio Iacobucci nel lavoro di tesi di laurea triennale in Chimica  
 Ottobre 2010 presso L' Università de L'Aquila.
- Genn. 07 – Segue Lipi Thukral nel lavoro di tesi di dottorato nel laboratorio  
 Luglio 2011 "*Computational Molecular Biophysics Group*" del Prof. Jeremy C. Smith,  
 IWR, Uni Heidelberg, Germania.
- Maggio 2006 – Segue Roland Schulz nel lavoro di tesi di diploma nel laboratorio  
 Aprile 2007 "*Computational Molecular Biophysics Group*" del Prof. Jeremy C. Smith,  
 IWR, Uni Heidelberg, Germania. Roland Schulz lavora attualmente come  
 studente di dottorato nel laboratorio "*Center for Molecular Biophysics*",  
 ORNL – Tennessee, USA.
- Marzo 2004 – Segue Giulia Rossetti nel lavoro di tesi di diploma nel gruppo del Prof.  
 Luglio 2005 Alfredo Di Nola, dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma  
 "La Sapienza". Giulia Rossetti lavora attualmente come studente di  
 dottorato nel gruppo "*Statistical and Biological Physics*", SISSA -  
 Trieste, Italia.
- Gen. 2004 – Segue Daniele Narzi nel lavoro di tesi di diploma nel gruppo del Prof.  
 Maggio 2005 Alfredo Di Nola, dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma  
 "La Sapienza". Daniele Narzi lavora attualmente come studente di  
 dottorato nel gruppo "*Theoretical and Computational Membrane Biology*"  
 del Dr. Rainer Böckmann, Università di Saarbrücken, Germania.

## Pubblicazioni selezionate

- 1 Zanetti-Polzi L., Aschi M., Amadei A. and Daidone I.\*  
*Alternative Electron-Transfer Channels Ensure Ultrafast Deactivation of Light-Induced Excited States in Riboflavin Binding Protein.* **J. Phys. Chem. Lett.** 2017, 9: 3321-3327.
- 2 Daidone I.\*, Thukral L., Smith J.C. and Amadei A.  
*Monitoring the folding kinetics of a  $\beta$ -hairpin by time-resolved IR spectroscopy in silico.* **J. Phys. Chem. B** 2015, 119: 4849-4856.
- 3 Zanetti-Polzi L., Daidone I., Bortolotti, C.A and Corni S.  
*Surface packing determines the redox potential shift of cytochrome c adsorbed on gold.* **J. Am. Chem. Soc.** 2014, 136: 12929-12937.
- 4 Daidone I., Amadei A., Zaccanti F., Borsari M. and Bortolotti C.A.  
*How the reorganization free energy affects the reduction potential of structurally homologous cytochromes.* **J. Phys. Chem. Lett.**, 2014, 5:1534-1540.
- 5 Bortolotti C.A., Amadei A., Aschi M., Borsari M., Corni S., Sola M. and Daidone I.\*  
*The reversible opening of two water channels in cytochrome c modulates the redox potential.* **J. Am. Chem. Soc.** 2012, 134:13670-13678.
- 6 Daidone I. and Amadei A.  
*Essential dynamics: foundation and applications.*  
**WIREs Comput. Mol. Sci.** 2012, 2:762-770.

- 7 Zanetti-Polzi L., Amadei A., Aschi M. and Daidone I.\*  
*Insight into the IR-spectra/structure relationship in amyloid fibrils: a theoretical study on a prion peptide.* **J. Am. Chem. Soc.** 2011, 133:11414-11417.
- 8 Daidone I.\*, Di Nola A.\* and Smith J.C.  
*Molecular origin of Gerstmann-Sträussler-Scheinker syndrome: insight from computer simulation of an amyloidogenic prion peptide.* **Biophys. J.** 2011, 100:3000-3007.
- Press/media release: UT Scientist Uncovers Trigger to Fatal Neurodegenerative Disease (<http://www.utk.edu/tntoday/2011/06/22/jeremy-smith-gss-protein/>)
- 9 Noé F., Doose S., Daidone I., Löllmann M., Sauer M., Chodera J. and Smith J.C.  
*Dynamical fingerprints: understanding biomolecular processes by combination of simulation and kinetic experiments.* **Proc. Natl. Acad. Sci. USA** 2011, 108:4822-4827.
- 10 Amadei A., Daidone I., Di Nola A. and Aschi M. *Theoretical-computational modelling of infrared spectra in peptides and proteins: a new frontier for combined theoretical-experimental investigations.* **Curr. Opin. Struct. Biol.** 2010, 20:155-161.
- 11 Thukral L., Smith J.C.\* and Daidone I.\*  
*Common folding mechanism of a  $\beta$ -hairpin peptide via non-native turn formation revealed by unbiased molecular dynamics simulations.* **J. Am. Chem. Soc.** 2009, 131: 18147-18152.
- 12 McLain S.E., Soper A.K., Daidone I., Smith J.C. and Watts A.  
*Charge based interactions between peptides observed as the dominant force for association in aqueous solution.* **Angew. Chem. Int. Ed.** 2008, 47: 9059-9062.
- 13 Neusius T., Daidone I., Sokolov I.M. and Smith J.C.  
*Subdiffusion in peptides originates from fractal-like structure of configuration space.* **Phys. Rev. Lett.** 2008, 100: 188103.
- 14 Daidone I., Ulmschneider M., Di Nola A., Amadei A. and Smith J.C.  
*Dehydration-driven solvent exposure of hydrophobic surfaces as a driving force in peptide folding.* **Proc. Natl. Acad. Sci. USA** 2007, 104:15230-15235.
- Press/media release: UT-ORNL Governor's Chair Unlocks Secrets of Protein Folding (<http://www.utk.edu/tntoday/2007/09/17/ut-ornl-governors-chair-unlocks-secrets-of-protein-folding/>)
- 15 Daidone I., Amadei A. and Di Nola A.  
*Theoretical characterization of  $\alpha$ -helix and  $\beta$ -hairpin folding kinetics.* **J. Am. Chem. Soc.** 2005, 127:14825-14832.
- 16 Daidone I., Roccatano D. and Hayward S.  
*Investigating the accessibility of the closed domain conformation of citrate synthase using essential dynamics sampling.* **J. Mol. Biol.** 2004, 339:515-525.

\* corresponding author

## Conferenze e seminari selezionati

- Maggio 2018 *Invited Speaker*: "Conference on the Complex Interactions of Light and Biological Matter: Experiments meet Theory", ICTP, Trieste (Italia).
- Gennaio 2015 *Invited Speaker*: Scuola Normale Superiore di Pisa "Protein folding in silico", Pisa (Italia).
- Sett. 2011 *Seminario*: "XXIV Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana", Lecce (Italia)
- Ottobre 2010 *Invited Speaker*: CECAM workshop "Protein folding dynamics: Bridging the gap between theory and experiment", Losanna (Svizzera)
- Luglio 2010 *Invited Speaker*: "2<sup>nd</sup> Meeting of the Italian and Spanish Crystallographic Associations (MISCA II)", Oviedo (Spagna)
- Febbraio 2010 *Invited Speaker*: Conference entitled "Physics of Protein Folding and Aggregation", Bressanone, (Italia)
- Maggio 2008 *Seminario*: EMBIO meeting "Emergent organisation in complex biomolecular systems", ECLT - Venezia (Italia)
- Ottobre 2006 *Invited Speaker*: Workshop "Neutron Scattering Highlights on Biological Systems", Taormina (Italia)
- Giugno 2005 *Seminario*: RTN meeting "Protein (mis) folding", Institut Pasteur de Lille (Francia)
- Marzo 2005 *Seminario*: ETH Zurich - RGP "Thermodynamic and kinetic characterization of peptide folding by extended molecular dynamics simulations", Zurigo (Svizzera)
- Gennaio 2004 *Poster*: Gordon Research Conference "Protein folding dynamics", Ventura, California (USA)
- Giugno 2003 *Poster*: Conference PROTEINE 2002 "XVI Meeting of the protein group of the Italian Society of Biochemistry and Molecular Biology", L'Aquila (Italia)
- Anni 2005-2009 *Seminario*: Annual workshop entitled "Methods of Molecular Simulation", Heidelberg (Germania)
- Anni 2002-2010 *Seminario*: Annual "Workshop on Molecular theories and simulations", Gaeta (Italia)

## Premi e riconoscimenti

- 10/04/2017 - 10/04/2023 Ottiene l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore universitario di Prima Fascia nel settore concorsuale 03/A2 (ai sensi dell'articolo 1 del decreto direttoriale n. 1532 del 29 luglio 2016).
- 12/04/2017 - 12/04/2023 Ottiene l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore universitario di Prima Fascia nel settore concorsuale 03/B1 (ai sensi dell'articolo 1 del decreto direttoriale n. 1532 del 29 luglio 2016).
- 29/01/2014-29/01/2020 Ottiene l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore universitario di Seconda Fascia nel settore concorsuale 03/A2 (ai sensi dell'articolo 1 del decreto direttoriale n. 222 del 20 luglio 2012).
- 23/12/2013 - 23/12/2019 Ottiene l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore universitario di Seconda Fascia nel settore concorsuale 03/B1 (ai sensi dell'articolo 1 del decreto direttoriale n. 222 del 20 luglio 2012).
- Anno 2010 Vince il prestigioso premio "Enrico Gavuzzo 2008-2009 per ricercatori nel

campo del DRUG DESIGN” bandito dall'istituto di cristallografia (IC) del CNR di Bari.

## Finanziamenti

Anno	Titolo	Programma	Valore (euro)
2006	[PI] A computational study of protein folding and fluorescence	EMBO long term fellowship	55000
2006	[PI] A computational study of protein folding and fluorescence (ProtFoldDyn)	Marie Curie Intra-European Fellowship	120000
2006	[Capo Unità] Investigating the mechanism of beta-hairpin folding: a combined fluorescence-based experimental and computational approach	DFG Research Grant (Deutsche Forschungsgemeinschaft - German Research Foundation)	200000
2014	[Capo Unità] Prediction of optical properties of dyes and application for the rational design of time temperature integrators	Fortissimo: Factories of the Future Resources, Technology, Infrastructure and Services for Simulation and Modelling (7th Framework Programme)	250000
2014	[Partecipante] Innovazione di prodotto e di processo per una manutenzione, conservazione e restauro sostenibile e programmato del patrimonio culturale	MIUR "SMART Cities and Communities and Social Innovation – Decreto Direttoriale 5 Luglio 2012 n. 391/RIC	13200000

## Partecipazione a collegi di dottorato

- Dal 01-10-2017- ad oggi      Membro del collegio dei docenti del dottorato in “Methods and Models for Molecular Sciences” presso la Scuola Normale Superiore di Pisa.
- dal 01-10-2012 al 30-09-2017      Membro del collegio dei docenti del dottorato in "Scienze Fisiche e Chimiche" presso L'Università degli studi de L'Aquila.
- dal 01-10-2009 al 30-09-2012      Membro del collegio dei docenti del dottorato in "Chimica per l'ambiente e per i beni culturali" presso l'Università degli studi de L'Aquila.

## Altri titoli

### **Direzione o partecipazione alle attività di un gruppo di ricerca caratterizzato da collaborazioni a livello nazionale o internazionale**

a) Partecipazione (2003 - 2008) e direzione (2009 – in corso) delle attività di un gruppo di ricerca sul “protein folding e misfolding” caratterizzato da collaborazioni a livello nazionale e internazionale (in particolare da una collaborazione stretta e continuativa con il professor J.C. Smith – Università di Heidelberg, Germania, e Oak Ridge National Laboratory, Tennessee USA). L'attività di ricerca - focalizzata sulla modellizzazione teorica/computazionale dei processi di “folding” e “misfolding” delle proteine - in taluni casi si è sviluppata in stretta cooperazione e complementazione con team di ricerca concentrati sugli aspetti di indagine sperimentale relativa alle medesime proteine (in particolare con il gruppo di spettroscopia “Applied Laserphysics & Laserspectroscopy” del Prof. Markus Sauer, dipartimento di Fisica, Università di Bielefeld, Germania).

Questa attività ha generato una produzione scientifica non occasionale su riviste indicizzate WOS-CC e Scopus, tra la quale - limitandoci agli articoli in cui I. Daidone figura come corresponding author – sono da considerare quelle del seguente elenco (parte dell'insieme complessivo delle pubblicazioni scientifiche):

- Narzi 2008, J. Chem. Theory Comput.
- Thukral 2009, J. Am. Chem. Soc.
- Daidone 2011, J. Mol. Biol.
- Thukral 2011, PloS Comput. Biol.
- Daidone 2012, Biophys. J.
- Daidone 2013, Biopolymers
- Thukral 2015, J. Mol. Biol.
- Daidone 2016, Chem. Phys. Lett.

b) Direzione delle attività di un gruppo di ricerca sulle proprietà dinamiche di molecole in soluzione attraverso l'utilizzo congiunto di tecniche sperimentali di scattering di neutroni e approcci teorico/computazionali. Questa attività si sviluppa in collaborazione con il gruppo di ricerca sperimentale della Dr.ssa Sylvia McLain, dipartimento di Biochimica di Oxford - UK, e ha generato, al momento, le seguenti due pubblicazioni (parte dell'insieme complessivo delle pubblicazioni scientifiche) su riviste indicizzate WOS-CC e Scopus ad alto fattore di impatto:

- McLain 2008, Angew. Chem. Int. Ed.
- Daidone 2012, Biophys. J.

c) Partecipazione (2010 - 2014) e direzione (2015 – in corso) delle attività di un gruppo di ricerca sulle proprietà elettroniche di macromolecole bioinorganiche caratterizzato da collaborazioni a livello nazionale e internazionale (in particolare da una collaborazione stretta e continuativa con il gruppo sperimentale del Prof. Marco Sola dell'Università degli studi di Modena e Reggio Emilia). L'attività di ricerca è focalizzata sullo sviluppo e applicazione di modelli simulativi per la descrizione di proprietà quantistiche in sistemi di elevata complessità configurazionale. In particolare il lavoro di I. Daidone si concentra sulla riproduzione teorica di spettri UV-visibile ed IR di macromolecole in soluzione e sullo studio di altre proprietà elettroniche, quali i potenziali redox e i meccanismi di trasferimento elettronico, sempre in sistemi di elevata complessità.

Questa attività ha generato una produzione scientifica non occasionale su riviste indicizzate WOS-CC e Scopus, tra la quale - limitandoci agli articoli in cui I. Daidone figura come corresponding author – sono da considerare quelle del seguente elenco (parte dell'insieme complessivo delle pubblicazioni scientifiche):

- Daidone 2010, Chem. Phys. Lett.
- Zanetti 2011, J. Am. Chem. Soc.
- Zanetti 2012, J. Phys. Chem. B
- Bortolotti 2012, J. Am. Chem. Soc.
- Zanetti 2013, J. Phys. Chem. B
- Daidone 2015, J. Phys. Chem. B



### **Organizzazione di conferenze**

- Co-organizzatrice del workshop "International Workshop on Protein Electron Transfer: from Fundamentals to Applications for Health", Modena, 29-30 Ottobre 2013.
- Co-organizzatrice del congresso della Società Chimica Italiana "TUMA 2012", Francavilla al Mare (CH), 18-20 Giugno 2012.

### **Attività di referaggio**

Svolge regolarmente attività di referaggio per diverse riviste scientifiche e in particolare per riviste dell'*American Chemical Society* (tra cui *J. Am. Chem. Soc.* e *J. Phys. Chem B*).

### **Competenze informatiche**

*Sistemi operativi*: installazione e utilizzo del calcolatore in ambienti *Unix/Linux, Windows*.

*Reti*: esperienza di gestione di reti di PC in ambiente *Linux*, approfondita durante gli anni di diploma e di dottorato.

*Linguaggi di programmazione*: Pascal, Fortran 77/90, C/C++, Awk, Python, html.

*Utilizzo di programmi di interesse scientifico*: Gromacs, CHARMM, Matlab, InsightII, GAUSSIAN.

*Applicativi "word processor"*: ottima conoscenza in ambiente *Linux (Latex)* e *Windows (Word)*.

### **Lingue conosciute**

*Italiano*: madrelingua.

*Inglese*: ottima conoscenza della lingua scritta e parlata.

*Svedese*: ottima conoscenza della lingua parlata e buona conoscenza della lingua scritta.

*Tedesco*: buona conoscenza della lingua parlata.