

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

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

Impiego attuale

Impiego attuale **Ricercatrice a tempo indeterminato (CHIM03)**
Sede: Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche, Università de L'Aquila, Italia.

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

- Giugno 2007– **Borsa post dottorato (Individual Marie Curie Fellowship)**
Feb. 2009 Sede: laboratorio "*Computational Molecular Biophysics Group*" del Prof. Jeremy C. Smith, IWR, Uni Heidelberg, Germania.
- Giugno 2005 – **Borsa post dottorato**
Maggio 2007 Sede: laboratorio "*Computational Molecular Biophysics Group*" del Prof. Jeremy C. Smith, IWR, Uni Heidelberg, Germania.

Nov. 2004 – **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".
Maggio 2005

Dal Giugno 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.
2007

Dal Luglio Collaborazione con il gruppo "*Applied Laserphysics & Laserspectroscopy*" del Prof. Markus Sauer, dipartimento di Fisica, Università di Bielefeld, Germania.
2006

Luglio 2003 Collaborazione con il Dr. Steven Hayward alla "*School of Computing Sciences*", Università della East Anglia, Norwich, Gran Bretagna.

Gen. 2000 – 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.
Maggio 2005

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 – Borsa di collaborazione presso la biblioteca del dipartimento di Chimica
Dic. 2000 "G. Illuminati" - Università degli studi di Roma "La Sapienza" .

Altre attività

8-19 Luglio Partecipazione alla "*11^a Scuola Estiva di calcolo parallelo*", CINECA, Casalecchio di Reno(BO), Italia.
2002

Gen. 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.
Aprile 2001

Attività didattica

Anni accad. Tiene il corso di "*Metodi Computazionali*" (6CFU) per la laurea triennale
2008-2013 in Chimica presso il dipartimento di Chimica dell'Università de L'Aquila.

Anni accad. Tiene il corso di "*Chimica Inorganica Superiore*" (9CFU) per la laurea

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.

Attività scientifica

- Simulazione di sistemi molecolari e macromolecolari con metodi basati sulla meccanica classica e metodi misti classico/quantistici
- Studi di meccanica statistica applicata a sistemi molecolari in generale e in particolare al processo di folding di proteine
- Sviluppo e applicazione di modelli teorici per lo studio della dinamica strutturale e della cinetica di folding di proteine
- Sviluppo e applicazione di metodi per aumentare l'efficienza di campionamento dello spazio delle fasi in simulazioni di dinamica molecolare (Essential Dynamics Sampling)
- Studio di reazioni chimiche in generale e in particolare di reazioni enzimatiche con metodi computazionali
- Interpretazione di spettri di sistemi macromolecolari in soluzione con tecniche di scattering neutronico, spettroscopia infrarossa e di fluorescenza con l'utilizzo di tecniche teorico-computazionali

Pubblicazioni selezionate

- 1 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.
- 2 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.
- 3 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.
- 4 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.
- 5 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.
- 6 Daidone I.*, Neuweiler H., Doose S., Sauer M. and Smith J.C. *Hydrogen-bond driven loop-closure kinetics in unfolded polypeptide chains.* **PLoS Comput. Biol.** 2010, 6(1): e1000645.
- 8 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.
- 9 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.
- 10 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.
- 11 Daidone I., Amadei A. and Di Nola A. *Theoretical characterization of α -helix and β -hairpin folding kinetics.* **J. Am. Chem. Soc.** 2005, 127:14825-14832.
- 12 Daidone I., Amadei A., Roccatano D. and Di Nola A. *Molecular dynamics simulation of protein folding by essential dynamics sampling: folding landscape of horse heart cytochrome c.* **Biophys. J.**, 2003, 85:2865-2871.

* corresponding author

Conferenze e seminari selezionati

- Sett. 2011 *Seminario*: "XXIV Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana", Lecce (Italia)
- Ottobre 2010 *Invited Speaker*: "Protein folding dynamics: Bridging the gap between theory and experiment", Losanna (Svizzera)
- Luglio 2010 *Invited Speaker*: "2nd Meeting of the Italian and Spanish Crystallographic Associations (MISCA II)", Oviedo (Spagna)
- Febbraio 2010 *Invited Speaker*: "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*: GRC "Protein folding dynamics", Ventura, California (USA)
- Giugno 2003 *Poster*: 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 on "Methods of Molecular Simulation", Heidelberg (Germania)
- Anni 2002-2010 *Seminario*: Annual "Workshop on Molecular theories and simulations", Gaeta (Italia)

Premi e riconoscimenti

- Anno 2014 Progetto della EU "fortissimo" (7th Framework Programme)
- Anno 2010 Vince il premio "Enrico Gavuzzo 2008-2009 per ricercatori nel campo del DRUG DESIGN" bandito dall'istituto di cristallografia (IC) del CNR di Bari.
- Dicembre 2006 Vince un finanziamento dal DFG (Deutsche Forschungsgemeinschaft - German Research Foundation) per 2 studenti di dottorato in collaborazione con il gruppo del Prof. Markus Sauer, "Applied Laserphysics & Laserspectroscopy", dipartimento di Fisica, Università di Bielefeld, Germania.
- Aprile 2006 Vince la borsa di studio europea bandita da "European Molecular Biology Organization": EMBO - long term Fellowship.

Luglio 2006 Vince la borsa di studio europea bandita da "Marie Curie Fellowship Association": Marie Curie Intra-European Fellowship (Sixth EU Framework Programme for Research and Technological Development).

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

Autorizzo il trattamento dei miei dati personali a norma della legge 675/96