

## CURRICULUM VITAE

### GENERALITÀ

Cognome: Dell'Acqua

Nome: Simone

Titolo: Dottore di ricerca in Scienze Chimiche

Ricercatore confermato presso l'Università degli Studi di Pavia, Dipartimento di Chimica

Data di nascita: 16 Aprile 1981      Luogo: Pavia

Nazionalità: Italiana

### DESCRIZIONE DELL'ATTIVITÀ DI RICERCA

L'attività di ricerca del dott. Simone Dell'Acqua è da collocare nel settore chimico disciplinare CHIM/03. In particolare, le linee di ricerca seguite sono da collocare nel campo della bioinorganica e della chimica di coordinazione, con particolare interesse per il settore delle biotecnologie; riguardano lo studio delle proprietà di metalloproteine e metalloenzimi, anche attraverso la sintesi e la caratterizzazione di modelli a basso peso molecolare. L'analisi fa largo uso di varie tecniche biochimiche per la purificazione e caratterizzazione di proteine e di diverse tecniche spettroscopiche per la determinazione strutturale del sito attivo e per ottenere informazioni su specie transienti del ciclo catalitico, oltre a diverse competenze nell'ambito della bioinformatica. Le principali attività di ricerca seguite sono elencate di seguito.

1) Rame-enzimi multinucleari – Ossido nitroso riduttasi: lo studio delle rame-proteine è incentrato su un enzima contenente un sito attivo multinucleare, l'ossido nitroso riduttasi (N2OR). Questo rame-enzima catalizza l'ultimo passo della denitrificazione, il processo metabolico dei batteri denitrificanti, costituito dalla riduzione bieletronica dell'ossido nitroso ad azoto molecolare. La struttura tridimensionale di questo enzima è stata recentemente risolta rivelando la presenza di un cluster rameico unico, il centro catalitico denominato CuZ, costituito da un cluster tetranucleare rame-zolfo, di cui è in corso la completa caratterizzazione delle proprietà elettroniche e del meccanismo di reazione.

2) Reattività di complessi metallo-peptide implicati in malattie neurodegenerative: Il morbo di Alzheimer e il morbo di Parkinson sono malattie neurodegenerative entrambe caratterizzate dalla presenza di depositi di proteine anomale nel cervello: placche senili (aggregati di  $\beta$ -amiloide) e grovigli neurofibrillari (aggregati di proteina tau) nell'Alzheimer o corpi di Lewy (aggregati di  $\alpha$ -sinucleina) per il Parkinson. Inoltre, lo sviluppo di queste malattie neurodegenerative è ulteriormente favorito dallo stress ossidativo indotto dai metalli redox-attivi, come rame e ferro, e la relativa formazione di specie reattive dell'ossigeno (ROS). Si cerca quindi di chiarire il legame dei metalli in diversi stati di ossidazione a queste proteine, o ai relativi frammenti peptidici che presentano siti coordinativi, e la reattività dei complessi metallo-peptide nei confronti di reazioni di ossidazione.

3) Trasferimenti elettronici tra proteine: le reazioni di trasferimento elettronico tra proteine sono essenziali per un grande numero di processi biologici che comprendono reazioni redox, come i processi metabolici, la fotosintesi e la respirazione aerobica. I complessi di trasferimento elettronico fanno parte di un gruppo di complessi proteina-proteina caratterizzati da un tempo di vita molto breve (nella scala dei millisecondi) e da una costante di affinità piccola ( $K_d$  nell'ordine delle  $\mu$ M). Queste caratteristiche, necessarie per un rapido trasferimento elettronico, rendono questi complessi difficili da studiare per via strutturale e spettroscopica. Una valida alternativa è rappresentata dalla simulazione dei complessi proteina-proteina grazie ad algoritmi di "docking". Questi programmi consentono di prevedere la natura di tali aggregati sulla base delle strutture tridimensionali delle proteine coinvolte nella reazione di trasferimento elettronico, tenendo conto della mobilità conformazionale dei residui amminoacidici superficiale preposti al riconoscimento e al legame tra le due proteine.

4) Complessi biomimetici multinucleari di rame: in questa linea di ricerca si è riprodotto su sistemi a basso peso molecolare sia il ciclo catalitico dei rame enzimi, con lo scopo di chiarirne il meccanismo d'azione, sia l'elevata attività, per ottenere catalizzatori efficienti. Sono stati sintetizzati complessi mononucleari e binucleari di rame con leganti poli-benzimidazolici, come modelli del sito attivo della tirosinasi.

### **PUBBLICAZIONI IN RIVISTE SCIENTIFICHE INTERNAZIONALI:**

- "Electron transfer complex between Nitrous Oxide Reductase and Cytochrome c552 from *Pseudomonas nautica*: kinetic, nuclear magnetic resonance, and docking studies." S. Dell'Acqua, S.R. Pauleta, E. Monzani, A.S. Pereira, L. Casella, J.J.G. Moura and I. Moura. *Biochemistry* 2008, 47 (41), 10852–10862.
- "A new CuZ active form in the catalytic reduction of N<sub>2</sub>O by nitrous oxide reductase from *Pseudomonas nautica*." S. Dell'Acqua, S.R. Pauleta, P. M. de Sousa, E. Monzani, L. Casella, J.J.G. Moura and I. Moura. *J. Biol. Inorg. Chem.* 2010, 15, 967-976.
- "The tetranuclear copper active site in nitrous oxide reductases: the CuZ center". S. Dell'Acqua, S.R. Pauleta, I. Moura, J.J.G. Moura, *J. Biol. Inorg. Chem.* 2011, 16, 183-194.
- "The electron transfer complex between nitrous oxide reductase and its electron donors". S. Dell'Acqua, I. Moura, J.J.G. Moura, S.R. Pauleta, *J. Biol. Inorg. Chem.* 2011, 16, 1241-1254.
- "Biochemical Characterization of the purple form of *Marinobacter hydrocarbonoclasticus* nitrous oxide reductase". S. Dell'Acqua, S.R. Pauleta, J.J.G. Moura, I. Moura, *Phil. Trans. R. Soc. B* 2012, 367, 1204-1212.
- "Nitrous oxide reductase". S.R. Pauleta, S. Dell'Acqua, I. Moura, *Coord. Chem. Rev.*, 2013, 332-349.
- "Copper (I)- $\alpha$ -Synuclein interaction: structural description of two independent and competing metal binding sites". F. Camponeschi, D. Valensin, I. Tessari, L. Bubacco, S. Dell'Acqua, L. Casella, E. Monzani, E. Gaggelli, G. Valensin, *Inorg. Chem.*, 2013, 52, 1358-1367.
- "Nitrous Oxide Reductase". S. Dell'Acqua, Sofia R. Pauleta, I. Moura, J.J.G. Moura. In "Encyclopedia of Metalloproteins - Copper". Edited by Stefano Ciurli. April 2013. Springer. *In Press*.

### **ATTIVITA' DIDATTICA**

Febbraio 2010

Docente di Chimica Generale e Inorganica: Corso di Specializzazione in tecniche Erboristiche, organizzato dal Centro Servizi Formazione, Pavia

Anni Accademici 2011-2012 e 2012-2013:

- 1) supplenza del corso di "Laboratorio di Chimica Generale ed Inorganica" (6 CFU) per il corso di laurea Interfacoltà di Biotecnologie dell'Università di Pavia.
- 2) supplenza del corso di "Laboratorio di Chimica Bioinorganica" (3 CFU) per il corso di laurea Interfacoltà di Biotecnologie dell'Università di Pavia.

Anni Accademici 2011-2012 e 2012-2013:

- 1) Titolare del corso di "Chimica Generale Avanzata" nell'ambito della Scuola Speciale di Tecnologia di Bergamo (ITS, scuola biennale post-diploma di scuola secondaria) per tecnico superiore per la ricerca e lo sviluppo di prodotti a base tecnologica.
- 2) Titolare del corso di "Laboratorio di Chimica Generale" nell'ambito della Scuola Speciale di Tecnologia di Bergamo (ITS, scuola biennale post-diploma di scuola secondaria) per tecnico superiore per la ricerca e lo sviluppo di prodotti a base tecnologica.