



Giulia Marigliani

📍 **Home** : Via Fosselle Sant'Antonio , 32, 04022, Fondi, Italy

✉ **Email**: giuliamarigliani@icloud.com 📞 **Phone**: (+39) 3317398455

Date of birth: 21 Apr 1997 **Nationality**: Italian

WORK EXPERIENCE

[3 Feb 2022 – 31 Jul 2024]

Pharmacist

Farmacia Dott. Grieco Carlo

City: Fondi | **Country**: Italy

EDUCATION AND TRAINING

[1 Oct 2017 – 21 Jul 2022]

Drug Chemistry and Technology

Università degli studi "La Sapienza" <https://www.uniroma1.it>

City: Roma | **Country**: Italy | | **Final grade**: 110 cum laude | **Thesis**: Predizioni di tasche allosteriche quali potenziali siti di legame per molecole bioattive

Lo studio è stato condotto al fine di identificare software e metodi atti ad effettuare una accurata predizione di tasche di legame per molecole organiche in assenza di informazioni pregresse. L'identificazione di cavità proteiche è un tema fondamentale nello studio delle interazioni intermolecolari e consente di ottenere informazioni utili alla progettazione di molecole bioattive. Nel presente studio è stato condotto una validazione di una serie di programmi tra i più comunemente utilizzati per l'identificazione di tasche proteiche quali possibili siti di legame di molecole organiche. Le performance dei software sono state valutate con un approccio sistematico in modo da poter identificare una strategia per la corretta predizione delle tasche di legame proteiche. L'utilizzo di metodi computazionali per la previsione di pocket potenzialmente accessibili, specie se affiancati ad esperimenti estremamente accurati, consentirebbe di ridurre sostanzialmente i tempi e i costi della ricerca farmaceutica.

L'identificazione dei siti di legame sulla superficie di una proteina è cruciale per definire la sua funzione, per chiarire il meccanismo delle attività cellulari, per il drug discovery e per le simulazioni di docking molecolare. Nel presente studio, infatti, si è andati ad esaminare se la combinazione incrociata di software permette di predire con una buona accuratezza un sito di legame senza avere informazioni pregresse sulla posizione del ligando. Per determinare la performance dei vari software adoperati nell'identificazione di pocket sono state usate quattro metriche: DCA, DCC, OLP e LCR. Queste sono state calcolate su dei dataset costituiti da complessi proteina-ligando utilizzati per la valutazione dei vari programmi.

L'analisi delle metriche ha portato alla luce che:

- OLP e LCR sono le principali metriche da considerare per la valutazione della predizione di tasche di legame di una proteina. In particolare, queste hanno evidenziato 3 combinazioni di software:
 1. Autosite-P2Rank, coppia che ha una percentuale di successo sempre maggiore al 50%.
 2. Autosite-Epos da utilizzare nel momento in cui P2Rank non identifichi la tasca corretta.
 3. Epos-Fpocket da utilizzare nel momento in cui sia P2Rank che Autosite non identifichino la tasca corretta
- DCC e DCA sono dei parametri puramente descrittivi che non possono essere usati per fare una predizione a priori di una tasca di legame, ma utilizzabili solamente a posteriori. Per questa ragione saranno ancora oggetto di studio.

LANGUAGE SKILLS

Mother tongue(s): Italian

Other language(s):

English

LISTENING B1 **READING** B1 **WRITING** B1

SPOKEN PRODUCTION B1 **SPOKEN INTERACTION** B1

Levels: A1 and A2: Basic user; B1 and B2: Independent user; C1 and C2: Proficient user

DIGITAL SKILLS

My Digital Skills

Microsoft Office | Microsoft Powerpoint | Microsoft Excel | Microsoft Word