

Paolo Calligari — Curriculum Vitae

Attuale Affiliazione

Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche
Università degli Studi di Roma - Tor Vergata
Via della Ricerca Scientifica
I-00133, Rome
Italy

email: paolo.calligari@uniroma2.it
email: paolo.calligari@gmail.com
url: <http://sites.google.com/site/paolocalligari/>
ORCID: [0000-0001-7614-8931](https://orcid.org/0000-0001-7614-8931)

Esperienza Professionale

- 2021-oggi** **Università degli Studi di Roma - Tor Vergata**
Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche
Dicembre 2021 : Ricercatore Universitario Tempo Determinato
(ex art. 24, comma 3, lettera a), legge 240/10)
- 2017-2020** **Università degli Studi di Roma - Tor Vergata**
Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche
2017-2019 : Assegno di Ricerca
2019-2020 : Borsa di Studio
Responsabile: Prof. Lorenzo Stella
- 2014-2017** **Università degli Studi di Padova**
Dipartimento di Scienze Chimiche
2014-2015 : Co.co.co - responsabile : Dott. Mirco Zerbetto
2015-2017 : Assegno di Ricerca - responsabile : Prof. Antonino Polimeno
- 2012-2014** **International School for Advanced Studies - SISSA - Trieste (Italy)**
Assegnista di Ricerca
NOFYSAS 2012 - Fondi di ricerca per giovani ricercatori indipendenti
- 2009-2012** **Ecole Normale Supérieure, Paris (France)**
Post-doctoral fellow
2009-2010 European Grant: I3 - Integrated Infrastructure Initiative.
2010-2011 ENS post-doctoral fellowship
2011-2012 ANR "Conception et Simulation" Project: SPUTNIK - Simulating experiments for the study of protein structure and dynamics.

Formazione

- 2004-2008** **Ph.D.** (Mention: Très honorable) - votazione massima
Université Pierre et Marie Curie, Paris, France
Ecole Doctorale Interface de la biologie avec la chimie, la physique et l'informatique
Relatore: Prof. Gerald R. Kneller, CNRS Orléans
Co-relatore: Prof. Mark Johnson, Institut Laue Langevin, Grenoble
Titolo tesi:¹ *Signature of protein adaptation to "warm deep sea" environment : the case of the Initiation Factor 6 studied by molecular dynamics and neutron scattering.*
Data della discussione: 18 December 2008.
Equipollenza con "Dottorato di Ricerca": Decreto Ministeriale n. 163 del 18/03/2015
- 2001-2002** ERASMUS - Student exchange program (10 mesi)
Ecole Normale Supérieure, Lyon, France

¹Il testo della tesi di dottorato è disponibile online all'URL: <https://tinyurl.com/pcalligari-phdthesis>

Corsi: Biochemistry, Molecular Biology, Statistical Physics

1999-2004 Laurea in Fisica, Indirizzo Fisica dei Biosistemi
Università degli Studi La Sapienza, Rome, Italy
Supervisor: Dr. Andrea Giansanti
Thesis: *Sequenze, matrici binarie e folding proteico.*

Premi e riconoscimenti

- 2020** **Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore universitario di II fascia.**
Settore concorsuale 02/D1 (FIS/07) - Fisica Applicata, Didattica e Storia della Fisica. Scadenza: 04/06/2030.
- 2012** NOFYSAS 2012 - Individual Research Grants for young researchers.
International School for Advanced Studies - SISSA - Trieste (Italy)
- 2012** Copertina del giornale The Journal of Chemical Physics – con il lavoro “Communication: A minimal model for the diffusion-relaxation backbone dynamics of proteins”, Journal of Chemical Physics, 136 (19), 191101 (2012).
- 2010** **Qualification aux fonctions de Maître de Conférences**
Abilitazione Nazionale alla candidatura a posizioni di “Assistant Professor” nelle Università francesi
Settori : Condensed Matter Physics (settore 28) and Biochemistry & MolecularBiology (settore 64).
- 2010** Post-doctoral fellowship, *Ecole Normal Supérieure, Paris*

Stages and Scuole

- 2019** **Corso di Perfezionamento - CINECA**
Corso di Perfezionamento del CINECA dal titolo “Introduction to Scientific and Technical Computing in C”, Roma 23-25 Settembre 2019.
- Corso di Perfezionamento - CINECA**
Corso di Perfezionamento del CINECA dal titolo “Introduction to parallel computing with MPI and OpenMP”, Roma 27-29 Maggio 2019.
- 2017** **Corso di Perfezionamento**
Corso “Computational approaches to the study of protein interactions and rational drug design”, 10-13 Aprile, 2017, Padova. Corso organizzato da ELIXIR, organizzazione intergovernamentale europea per le scienze della vita.
- Corso di Perfezionamento - CINECA**
Corso di Perfezionamento dal titolo “Introduction to Marconi KLN cluster, for users and developers”
Roma, 23/10/2017.
- 2016** **Corso di Perfezionamento - CINECA**
Corso di Perfezionamento del CINECA dal titolo “Parallel I/O and management of large scientific data”. Roma 18-19 Maggio 2016.
- 2011** **School of Pure and Applied Biophysics**
Subject: Protein Stability and Pathways of Self-Assembly
Venezia, 24-28 Gennaio.
- 2007-2008** **Visiting Scientist al NIST Center for Neutron Research**
NIST, Washington DC, USA, Luglio 2007 et Marzo 2008.

2006

Internato di biochimica delle proteine

Deuteration Laboratory, **ILL/EMBL**, Grenoble, Maggio-Ottobre 2006.

Espressione e purificazione della proteina estremofila IF6 isolata da *M. Jannaschii* et du *S. cerevisiae*.

Supervisors: Michael Haertlein e Trevor Forsyth

- 2006** **CCP5 and Marie Curie Actions: Methods in Molecular Simulation Summer School**
University of Cardiff, Wales, United Kingdom.
Session: Simulation of Organic and Bio-Molecules
(Lectures e Practicals)
- 2006** **Higher European Research Course for Users of Large Experimental Systems** (H.E.R.C.U.L.E.S.)
ESRF e ILL, Grenoble, France e ELETTRA Synchrotron, Trieste
Session: Neutron and Synchrotron Radiation for Biomolecular Structure and Dynamics
(Lectures, Tutorials e Practicals.)
- 2005** **Stage breve in Bioinformatica**
Université Pierre et Marie Curie (Paris VI), Paris.
Session: Algorithms and statistical bases for sequence analysis.
Supervisor: Joel Pothier.
- 2001-2002** **Stage pre-laurea**
Centre de Biophysique Moléculaire (CBM) - CNRS Orleans
Titolo: Relaxation process in biomolecules by molecular simulation and signal analysis.
Supervisors: Prof. G. Kneller and K. Hinsén.

Attività Didattica

- 2019-2020** Esercitazioni/Tutoraggio per il corso di Fisica Generale I, nel Corso di Laurea in Ingegneria Medica presso il Dip. di Ingegneria, Università di Roma "Tor Vergata". 30h.
- 2019-2020** Tutoraggio e supporto alla didattica presso la Macroarea di Ingegneria dell'Università di Roma "Tor Vergata". Lezioni e esercitazioni di matematica di base per gli studenti del primo anno dei corsi di laurea in Ingegneria. 160 h.
- 2016** Winter school "SMART 2015 - Space-time Multiscale Approaches for Research and Technology", Scuola Normale di Pisa, 25-29 January 2016, Tutorials.
- 2010-2011** Université Paris Nord - Docente a contratto
48h Esercitazioni- Fisica: Meccanica - Corso di Laurea in Biochimica e Biologia
24h Laboratorio- Fisica: Ottica e Onde - Corso di Laurea in Biochimica e Biologia
- Université Paris Descartes - Docente a contratto
30h Esercitazioni- Fisica: Meccanica - Corso di Laurea in Scienze Biomediche
30h Esercitazioni- Fisica: Ottica - Corso di Laurea in Scienze Biomediche

Tutoraggio Studenti

- 2017-2019** Valerio Santucci - dottorando - Università di Roma "Tor Vergata" (Supervisor: Prof. G. Bocchini)
- 2015-2017** Marco Gerolin - dottorando - Università di Padova (Supervisor: Prof. Antonino Polimeno)
- 2010-2012** Caroline Struvay - dottoranda - Université de Liege (Belgium) (Supervisor Prof. Georges Feller)

Attività di Ricerca

Durante il dottorato di ricerca Paolo Calligari (P.C.) ha potuto completare l'originaria formazione in fisica computazionale con l'apprendimento di tecniche di spettroscopia neutronica e di diffusione della luce e raggi X, oltre alle tecniche di espressione e purificazione delle proteine. L'applicazione operativa di queste nuove competenze, attraverso diverse campagne di esperimenti presso reattori nucleari per la ricerca (ILL, PSI, NIST), ha permesso al candidato di affrontare le problematiche scientifiche poste dal programma di ricerca svolto, occupandosi, in particolare, dello sviluppo di specifici protocolli di purificazione per proteine di organismi adattati a condizioni ambientali estreme e seguendo direttamente la realizzazione di apparati strumentali specifici per la realizzazione di misurazioni di spettri di diffusione quasielastica di neutroni in condizioni termodinamiche biologicamente estreme.

L'attività di ricerca post-dottorale ha permesso al candidato di acquisire ulteriori competenze in altre tecniche sperimentali quali la risonanza magnetica nucleare e elettronica.

L'attività di ricerca del candidato è prevalentemente dedicata allo studio delle proprietà strutturali e dinamiche di proteine in soluzione e in membrana ed è affrontata con approcci combinati di tecniche sperimentali e computazionali/teoriche. Questa linea ha portato P.C. ad affrontare questioni di biofisica fondamentale, come la caratterizzazione delle proprietà strutturali e dinamiche di proteine in condizioni ambientali estreme e i meccanismi di interazione proteina-proteina e ligando-proteina. Quest'ultima tematica ha prodotto significativi sviluppi applicativi in diversi lavori dedicati all'individuazione di possibili inibitori di proteine in condizioni patogeniche.

Parte rilevante della sua attività è stata inoltre dedicata allo sviluppo di metodi teorici e computazionali per una efficace interpretazione di dati sperimentali attraverso l'analisi combinata con dati computazionali. Questo ambito di lavoro ha portato a un più diretto coinvolgimento nello sviluppo di software dedicati: in particolare nMoldyn, programma interattivo realizzato per il calcolo e la decomposizione di spettri di diffusione di neutroni a partire da traiettorie di dinamica molecolare; e Screwfit, programma per la caratterizzazione fine della struttura secondaria delle proteine.

Più recentemente, la sua attività di ricerca si è concentrata sull'utilizzo di diversi approcci computazionali per caratterizzare il meccanismo di regolazione allosterica della fosfatasi SHP2, proteina multi-dominio coinvolta in diverse tipologie di cancro e in alcune malattie genetiche rare. Questa attività è svolta in collaborazione con l'Istituto Superiore di Sanità (Dott. S. Martinelli) e l'Ospedale pediatrico Bambino Gesù di Roma (Dott. M. Tartaglia).

Indicatori bibliometrici

H-index : 13

Citazioni : 672

Ultimo aggiornamento: 10/2022 (Google Scholar)

Sviluppo Software

Parte dell'attività di ricerca è stata dedicata allo sviluppo di metodi teorici e computazionali finalizzati ad una efficace interpretazione di dati sperimentali (X-RAY, QENS, NMR) mediante l'analisi combinata con dati computazionali. Questo ambito di lavoro ha portato a un più diretto coinvolgimento nello sviluppo di software dedicati:

- 2006-2014** **ScrewFit** Programma per la caratterizzazione della struttura secondaria delle proteine.
- 2005-2010** **nMoldyn**, programma interattivo realizzato per il calcolo e la decomposizione di spettri di diffusione di neutroni a partire da traiettorie di dinamica molecolare (<http://dirac.cnrs-orleans.fr/nMOLDYN.html>)

Pubblicazioni

Articoli su riviste internazionali con sistema di "peer-review"²

- 2021** Calligari P, Santucci V, Stella L, Bocchinfuso G. "Discriminating between competing models for the allosteric regulation of oncogenic phosphatase SHP2 by characterizing its active state", *Comp. Struct. Bio. J.*, doi: 10.1016/j.csbj.2021.10.041 (in press).
- Bobone S, Pannone L, Biondi B, Solman M, Flex E, Canale VC, Calligari P, et al., and Stella L. "Targeting Oncogenic Src Homology 2 Domain-Containing Phosphatase 2 (SHP2) by Inhibiting Its Protein-Protein Interactions", *J. Med. Chem., ASAP* doi:10.1021/acs.jmedchem.1c01371
- 2020** Polovitskaya MM, Barbini C, Martinelli D, Harms FL, Sessions Cole F, Calligari P, Bocchinfuso G, Stella L, Ciolfi A, Niceta M, et al. "A Recurrent Gain-of-Function Mutation in CLCN6, Encoding the CIC-6 Cl⁻/H⁺-Exchanger, Causes Early-Onset Neurodegeneration", *Amer. J. Hum. Gen.*, **107** (6), 1062-1077.
- Gioia M, Ciaccio C, Calligari P, De Simone G, Fasciglione GF, di Masi A, Di Pierro D, Bocedi A, Ascenzi P, Coletta M. Role of proteolytic enzymes in the COVID-19 infection and promising therapeutic approaches, *Biochemical Pharmacology*, **182**, 114225.
- Anselmi M, Calligari P (co-first authors), Hub J, Tartaglia M, Bocchinfuso G, Stella L. "Structural Determinants of Phosphopeptide Binding to the N-Terminal Src Homology 2 Domain of the SHP2 Phosphatase, *Journal of Chemical Information and Modelling*, **60** (6), 3157–3171.
- Calligari P, Bobone S, Ricci G, Bocedi A. Molecular investigation of Covid-19 proteins and their interactions with antiviral drugs. *Viruses*, 12(4), 445.
- Martinelli S., Pannone L., Lissewski C., Brinkmann J., Flex E., Schanze D., Calligari P., Anselmi M., Pantaleoni F., Canale, V.C., Ioannides A., Rahner N., Josifova D., Bocchinfuso G., Stella L., Ryten M., Tartaglia M., Zenker M., Pathogenic PTPN11 variants involving the poly-glutamine Gln255-Gln256-Gln257 stretch highlight the relevance of helix B in SHP2's functional regulation. *Human Mutation*, 41,6,1171-1182.
- Calligari P, Torsello M, Bortoli M, Polimeno A and Orian L. Modelling of Ca²⁺-promoted structural effects in wild type and post-translationally modified Connexin26. *Molecular Simulation*, 46 (3), 235-245.
- 2019** Keshavan S, Calligari P, Stella L, Fusco L, Delogu L, Fadeel B. Nano-bio interactions: a neutrophil-centric view, *Cell Death & Disease*, 10:569.
- Varnava K G, Mohid Sk. A, Calligari P, Stella L, Reynnison J, Bhunia A, and Sarojini V. Design, Synthesis, Design, Synthesis, Antibacterial Potential, and Structural Characterization of N-Acylated Derivatives of the Human Autophagy 16 Polypeptide, *Bioconjugate Chem*, 30, 7, 1998-2010.
- 2018** Tuan Tran A, Sadet A, Calligari P, Lopes P, Ouazzani J, Sollogoub M, Miclet E and Abergel A., Targetting the Pentose Phosphate Pathway: characterization of a new 6PGL inhibitor. *Biophysical J.*, **115**, 1-13.
- Bauer CK, Calligari P, Radio FC, Caputo V, Dentici ML, Falah N, High F, Pantaleoni F, Barresi S, Ciolfi A, Pizzi S, Bruselles A, Person R, Richards S, Cho MT, Claps Sepulveda DJ, Pro S, Battini R, Zampino R, Digilio MC, Bocchinfuso G, Dallapiccola B, Stella L, Tartaglia M. Gating-affecting mutations in *kcnk4* cause a recognizable neurodevelopmental syndrome. *Am. J. Human Gen.*, **103**(4), 621-630.
- Mukherjee S, Bondarenko O, Kohonen P, Andón F, Brzicová T, Gessner I, Mathur S, Bottini M, Calligari P, Stella L, Kisin E, Shvedova A, Autio R, Salminen-Mankonen H, Lahesmaa R, and Fadeel B. Macrophage sensing of single-walled carbon nanotubes via Toll-like receptors. *Scientific Reports*,

²Il simbolo • indica gli articoli in cui il candidato ha svolto il ruolo di "corresponding author".

- 2017** Gerolin, M.; Zerbetto, M.; Moretto, A.; Formaggio, F.; Toniolo, C.; van Son, M.; Shabestari, M.; Huber, M.; **Calligari P.**; Polimeno, A. *An Integrated Computational Approach to the Electron Paramagnetic Resonance Characterization of Rigid 3_{10} -Helical Peptides with TOAC Nitroxide Spin Labels*, *J. Phys. Chem. B*, **121** (17), 4379-4387.
- **Calligari PA**, Gerolin M, Abergel D, Polimeno A. *Decomposition of Proteins into Dynamic Units from Atomic Cross-Correlation Functions*, *J Chem Theor and Comp*, 2017, 13 (1), pp 309-319.
- 2015** • **Calligari PA**, Calandrini V, Ollivier J, Artero JB, Haertlein M, Johnson M, Kneller GR. *Adaptation of Extremophilic Proteins with Temperature and Pressure: Evidence from Initiation Factor 6*, *J Phys Chem B*, 2015 Jun 25;119(25):7860-73.
- 2014** • **Calligari P** and Abergel D, *Multiple Scale Dynamics in Proteins Probed at Multiple Time Scales through Fluctuations of NMR Chemical Shifts*, *J. Phys. Chem. B*, **118**(14):3823–31.
- 2012** **Calligari P** and Abergel D, *Towards the characterization of fractional stochastic processes underlying methyl dynamics in proteins*. *J. Phys. Chem. B*, **116**(43):12955–12965.
- Calligari P.A.** and Kneller G.R., *ScrewFit: Combining localization and description of protein secondary structure*. *Acta Crystallographica D*, **68**, 1690–1693.
- Kneller, G.R., Hinsen, K. and **Calligari, P.**, *A minimal model for the diffusion-relaxation backbone dynamics of proteins*. *J. Chem. Phys.*, **136**, 191101 - COVER ARTICLE.
- Calligari P.A.**, Salgado G.F., Pelupessy P., Lopes P., Ouazzani J., Bodenhausen G. and Abergel, D., *Insights into internal dynamics of 6-Phosphogluconolactonase from Trypanosoma brucei studied by NMR and Molecular Dynamics*, *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*, **80**(4), 1196-1210.
- 2011** **Calligari P.A.**, Calandrini V., Kneller G., Abergel D., *From NMR Relaxation to Fractional Brownian Dynamics in Proteins : Results from a Virtual Experiment*, *J. Phys. Chem. B*, **115**(43):12370-9.
- Chevrot G., **Calligari P.**, Hinsen K., and Kneller G.R., *Least constraint approach to the extraction of internal motions from molecular dynamics trajectories of flexible macromolecules*, *J. Chem. Phys.*, **135**, 084110.
- 2009** • **Calligari P.A.**, Kneller G.R., Giansanti A., Ascenzi P., Porrello A., Bocedi A. *Inhibition of viral group-1 and group-2 neuraminidases by oseltamivir: a comparative structural analysis by the ScrewFit algorithm*. *Biophysical Chemistry*, **141**(1), 117-123.
- 2008** Calandrini V., Hamon V., Hinsen K., **Calligari P.**, Bellisent-Funel M.-C. and Kneller G.R., *Relaxation dynamics of lysozyme in solution under pressure: combining molecular dynamics and quasielastic neutron scattering*. *Chemical Physics*, **345**, 289-297.
- 2006** Hamon V., **Calligari P.**, Hinsen K., Kneller G.R. *Simulation studies of structural changes and relaxation processes in lysozyme under pressure*, *J. of Non-Crystalline Solids*, **352**, 4417-4423.
- Kneller G.R. and **Calligari P.**, *Efficient characterisation of protein secondary structure in terms of screw motions*. *Acta Crystallographica D***62**, 302-311, (2006) - COVER ARTICLE.

Monografie - contributi con sistema di "peer-reviewing"

- 2011** Calandrini V., Pellegrini E., **Calligari P.**, Hinsen K., Kneller R.G., *nMoldyn - Interfacing spectroscopic experiments, molecular dynamics simulations and models for time correlation functions*, *Collection SFN*, **12**, 201-232. doi: <http://dx.doi.org/10.1051/sfn/201112010>.
- 2010**

M.R. Johnson, M. Zbiri, M.A. Gonzalez, E. Pellegrini, **Calligari, P.**, L. Capogna, E. Farhi, A. Filhol, R. Ghosh et D. Richard, *Diffusion inélastique des neutrons et simulations atomistiques*, Collection SFN, **10**, 427-447. doi: 10.1051/sfn/2010007 .

Altre pubblicazioni

- 2019** **Conference Abstract** : Radio, F. C., Calligari, P., Caputo, V., Dentici, M. L., Falah, N., High, F., et al. *Gating-affecting mutations in KCNK4 cause a recognizable neurodevelopmental syndrome. European Journal of Human Genetics*, 27, 504-1504).
- 2018** **PDB entry** : Structure 5ZYX: Solution NMR structure of K30 peptide in 10 mM dioctanoyl phosphatidylglycerol (D8PG) DOI: 10.2210/pdb5ZYX/pdb