

## Curriculum Vitae

### Informazioni Personali

Cognome e Nome	Caselli Emilia
Indirizzo Ufficio	Via Campi 103, 41125 Modena (MO)
Tel. Ufficio	+39 059 2058586
e-mail	emilia.caselli@unimore.it

### Istruzione e Carriera Accademica

Dicembre 2018- ad ora	Professore Associato di Chimica Organica
Dicembre 2015–2018	Ricercatore a Tempo Determinato- <i>track b</i> , Dipartimento di Scienze della Vita, Università di Modena e Reggio Emilia
Gennaio 2015	Abilitazione Scientifica Nazionale a professore di seconda fascia, Settore Concorsuale 03/D1-Chimica e Tecnologie Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutiche, seconda tornata
Novembre 2014	Abilitazione Scientifica Nazionale a professore di seconda fascia, Settore Concorsuale 03/C1-Chimica Organica, seconda tornata
2014–2015	Contratto di Collaborazione Coordinata e Continuativa (CoCoCo, 12 mesi), Dipartimento di Scienze della Vita, Università di Modena e Reggio Emilia. Titolo del contratto “ <i>Sfide alla Resistenza agli Antimicrobici mediata da <math>\beta</math>-Lattamas</i> ”
2009–2014	Co-fondatore e Direttore della Ricerca dello spin off accademico “ <i>TheraBor Pharmaceuticals</i> ”, dedicato allo sviluppo di una piattaforma tecnologica di prodotti contenenti il Boro.
2011–2012	Assegno di Ricerca (AdR, 12 mesi), Dipartimento di Scienze della Vita, Università di Modena e Reggio Emilia. Titolo del contratto “ <i>Progettazione e Sintesi Stereoselettiva di Inibitori di <math>\beta</math>-Lattamas</i> ”
2009–2011	Assegno di Ricerca (AdR, 24 mesi), Dipartimento di Chimica, Università di Modena e Reggio Emilia. Titolo del contratto “ <i>Progettazione e Sintesi Stereoselettiva di Inibitori di <math>\beta</math>-Lattamas</i> ”
2005-2009	Contratto di Collaborazione Coordinata e Continuativa (CoCoCo, 33 mesi), Dipartimento di Chimica, Università di Modena e Reggio Emilia. Titolo del contratto “ <i>Struttura, Meccanismo e Inibizione della <math>\beta</math>-Lattamase SHV</i> ”
2002-2005	Assegno di Ricerca (AdR, 24 mesi), Dipartimento di Chimica, Università di Modena e Reggio Emilia. Titolo del contratto “ <i>Progettazione e Sintesi Stereoselettiva di potenziali inibitori di <math>\beta</math>-Lattamas</i> ”
2001	Contratto di Collaborazione Coordinata e Continuativa (CoCoCo, 12 mesi), Dipartimento di Chimica, Università di Modena e Reggio Emilia. Titolo del contratto “ <i>Sintesi di Potenziali Inibitori di <math>\beta</math>-Lattamas</i> ”
Gennaio 2001	Conseguimento del titolo di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche: “ <i>Progettazione e Sintesi di Inibitori di <math>\beta</math>-Lattamas</i> ”, supervisore Prof. F. Prati.

2000	Visiting Ph.D. Student (3 mesi) presso il Department of Medicinal Chemistry, Northwestern University, Chicago, supervisore Prof. B. K. Shoichet.
1998-1999	Visiting Ph.D. Student (13 mesi) presso il Department of Medicinal Chemistry, Northwestern University, Chicago, supervisore Prof. B. K. Shoichet.
1997–2001	Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche: “ <i>Progettazione e Sintesi di Inibitori di <math>\beta</math>-Lattamasi</i> ”, supervisore Prof. F. Prati.
1997	Laurea in Chimica (110/110).
1995	Bachelor of Science in Pure and Applied Chemistry, University of Strathclyde, Glasgow, third class Honours
1994-1995	Progetto Erasmus (9 months) presso University of Strathclyde, Glasgow
1990–1997	Corso di laurea in Chimica, Facoltà di Chimica, Università di Modena

### Congedi di Maternità

2002-2003	Congedo di maternità (Nov 2002-Apr 2003, 5 mesi)
2004-2005	Congedo di maternità (Lug 2004-Ago 2005, 13 mesi)
2007	Congedo di maternità (Feb 2007-Nov 2007, 9 mesi)
2011–2012	Congedo di maternità (Sett 2011-Apr 2012, 8 mesi). Dal 2020 usufruisco di congedi 104

### Attività di Ricerca

Sintesi Stereoselettiva Biocatalizzata	Risoluzione enzimatica di 2-idrossimetilaziridine ( <i>J Chem Soc, Perkin Trans, 2002</i> ) e di aziridine carbossilate catalizzata da <i>Lipasi</i> , seguite da reazione di apertura di anello per ottenere aspartati $\beta$ -sostituiti stereochimicamente attivi ( <i>JOC, 1997</i> )
Sintesi di Acidi Boronici come Sonde Molecolari	In collaborazione con il Prof B. K. Shoichet, presso il cui laboratorio ho trascorso 13 mesi durante il mio dottorato di ricerca, abbiamo progettato e sintetizzato una famiglia di acidi $\alpha$ -acilamminometanboronici come nuova classe di inibitori di $\beta$ -lattamasi. Questi acidi boronici, recanti le canoniche catene ammidiche degli antibiotici $\beta$ -lattamici, hanno permesso un'analisi energetica quantitativa del riconoscimento molecolare enzima-substrato di questi gruppi, tipici degli antibiotici, con gli enzimi responsabili della resistenza antibatterica ( <i>Chem Biol, 2001</i> , WO Patent, <b>2002</b> )
Sintesi Stereoselettiva di Acidi Boronici Inibitori Nanomolari	Gli acidi $\alpha$ -acilamminometanboronici sono stati ulteriormente derivatizzati mediante inserzione diastereoselettiva di un gruppo <i>meta</i> -carbossifenile sul carbonio alfa al boro, attraverso ottimizzazione della ben nota omologazione di Matteson. Questa nuova classe di composti si sono dimostrati eccellenti inibitori di $\beta$ -lattamasi ( <i>Biochem, 2001</i> , <i>JACS, 2003</i> )
Progettazione e Sintesi di Inibitori Boronici come Potenziali Farmaci	Gli acidi boronici sintetizzati, oltre ad essere inibitori enzimatici nanomolari hanno dimostrato di avere un buon profilo farmacologico, aprendo la possibilità di utilizzo con potenziali farmaci. A partire dal 2008 un'importante collaborazione con il microbiologo clinico Prof R. Bonomo (Case Western University, Cleveland) ha iniziato a esaminare nel dettaglio questa possibilità ( <i>Biochem, 2009</i> ; <i>Biochem, 2010</i> ; <i>Prot Sci, 2011</i> )

Acidi Boronici come Agenti Derivattizzanti Chirali (CDA)	Sintesi Enantioselettiva di Acidi Boronici Chirali come CDA. Sviluppo di una nuova strategia per la determinazione della composizione enantiomerica di miscele di dioli 1,2, attraverso la formazione di boronati ciclici. ( <i>Org Lett.</i> <b>2003</b> ; <i>Tet Asymm.</i> <b>2005</b> )
Acidi Boronici attivi verso Ceppi Resistenti	Sintesi di acidi boronici chirali ottimizzati per un'attività verso ceppi batterici resistenti che esprimono Serina $\beta$ -Lattamasi ad Ampio Spettro (Extended Serine Beta-Lactamases, ESBLs) ( <i>J Med Chem</i> , <b>2013</b> , <i>Biochem</i> , <b>2014</b> ) così come verso ceppi resistenti di <i>Mycobacterium tuberculosis</i> ( <i>ACS Infec Dis</i> , <b>2015</b> ) e <i>Carbapenemasi</i> (AAC, <b>2016</b> , AAC, <b>2020</b> , PCT Patent <b>2022</b> ), AAC <b>2023</b> ).
Studi SAR: Sintesi di Acidi Sulfonammido Boronici	Studi di Structure Activity Relationship (SAR) e ottimizzazione del composto lead di acidi $\alpha$ -acilammido boronici sono stati condotti tramite sostituzione della catena ammidica con una sulfonammide. La nuova classe di composti sintetizzati, oltre ad avere attività inibitoria sub-nanomolare delle $\beta$ -lattamasi di classe C, ha anche dimostrato attività <i>in vivo</i> su topi affetti da sepsi ( <i>J Med Chem</i> , <b>2010</b> ; <i>PNAS</i> , <b>2012</b> , WO Patent <b>2013</b> , Antibiotics, <b>2023</b> )
Sintesi di Acidi Boronici che contengono un anello triazolico	Sintesi di acidi 1-ammido-2-triazoliletanboronici chirali ( <i>J. Med. Chem.</i> , <b>2015</b> ; <i>AAC.</i> , <b>2016</b> , back to back papers, WO Patent <b>2013</b> ) e di acidi (1,2,3-triazol-1-yl)-metanboronici ( <i>Eur. J. Org. Chem.</i> , <b>2015</b> , <i>ACS Infect. Dis.</i> , <b>2017</b> , US Patent, <b>2017</b> , <i>Chem Med Chem</i> <b>2020</b> , <i>ACS Infec Dis</i> , <b>2020</b> , <i>AAC</i> , <b>2023</b> , <i>J. Med. Chem.</i> , <b>2023</b> ) attraverso Cicloadizione Rame Catalizzata di azide e alchino (CuAAC)
Acidi Boronici come Inibitori di Biofilm da <i>Pseudomonas</i>	Studio per verificare l'attività antibiofilm di acidi boronici precedentemente sintetizzati, ed indagine cellulare sul possibile meccanismo di inibizione del Quorum Sensing ( <i>Frontiers in Microbiol</i> , <b>2020</b> )
Sintesi di $\alpha$ -boril isonitrili chirali	Sintesi innovativa di $\alpha$ -boril isonitrili chirali recanti catene amminoacidiche come building block per reazioni multicomponente ( <i>Org Biomol Chem</i> , <b>2021</b> )
Kinetic Target Guided Sintesis di inibitori di $\beta$ -lattamasi	Sintesi <i>in situ</i> di inibitori di enzimi clinicamente rilevanti (AmpC, KPC-2 etc..)attraverso reazione di click chemistry fra un'azide boronica e una libreria di alchini (manoscritto in preparazione)

### Finanziamenti Ottenuti su base competitiva

Aprile 2024-Marzo 2029	National Institute of Health (USA), 2R01AI072219-06A1 "Understanding $\beta$ -lactam resistance in <i>Acinetobacter Baumannii</i> " Coordinatore: Prof. Robert Bonomo, Case Western Reserve University, Cleveland (Ohio, USA) Ruolo: Responsabile locale Importo: US \$ 46.656,00/anno (quota UNIMORE)
Maggio 2024-Maggio 2026	HORIZON-MSCA-2023-PF-01 - Marie Curie Postdoctoral Fellowship "Boronic Acids as a New Strategy to Boost beta-Lactam Antibiotics for the Treatment of Tuberculosis" (BAN-BOOT) Ruolo: Supervisor Beneficiario: Valentina Villamil

Lug 2023-Giu 2025	MIUR, PRIN2022 <i>Fighting CARbapenemase RESistance by kinetic target guided Synthesis (CARESS)</i> Coordinatore: Prof Maria Grazia Perilli (UNIAQ) Ruolo: Responsabile unità UNIMORE – Importo € 89.680,00
Ott 2022-Ott 2024	HORIZON-MSCA-2021-PF-01 - Marie Curie Postdoctoral Fellowship <i>"Beta-Lactamase Inhibitors Synthesised through in Situ click chemistry"(BLISS)</i> Ruolo: Supervisor Beneficiario: Nicolò Santi
Set 2019-Ago 2023	National Institute of Health (USA), 2R01AI072219-06A1 Subaward N° RES514832 <i>"Understanding <math>\beta</math>-lactam resistance in Acinetobacter Baumannii"</i> Coordinatore: Prof. Robert Bonomo, Case Western Reserve University, Cleveland (Ohio, USA) Responsabile locale: Prof. Prati Fabio – Ruolo: <i>Key Personnel</i> – Importo: US \$ 35.683,00/anno (quota UNIMORE)
Gen 2019-Dic 2023	National Institute of Health (USA), 2 R01 AI063517-11A1 Subaward N° RES514059 <i>"Challenges in beta-Lactamase Mediated Resistance"</i> Coordinatore: Prof. Robert Bonomo, Case Western Reserve University, Cleveland (Ohio, USA). Responsabile locale: Prof. Prati Fabio – Ruolo: <i>Key Personnel</i> – Importo: US\$ 38.989,00/anno (quota UNIMORE)
Mag 2017 - Dic 2020	FFABR (Finanziamento delle Attività Base di Ricerca) – Importo: € 3.000
Mar 2017 - Mar 2019	FAR (Fondo di Ateneo alla Ricerca, Università di Modena e Reggio Emilia) <i>"Boronic Acids as AI-2 Quorum Sensing Inhibitors affecting Biofilm Formation".</i> Coordinatore: Emilia Caselli – Importo € 4.650
Nov 2014 - Mar 2019	Harrington Discovery Institute (Cleveland, OH, USA) <i>"Development of Novel Agents to Treat Emerging Infectious Disease Threats"</i> Coordinatore: Prof. Robert Bonomo, Case Western Reserve University, Cleveland (Ohio, USA). Responsabile locale: Prof. Prati Fabio – Ruolo: <i>Key Personnel</i> – Importo: US\$ 100.000 (quota UNIMORE)
Giu 2014 - Mar 2019	National Institute of Health (USA), 2R01AI072219-06A1 <i>"Understanding <math>\beta</math>-lactam resistance in Acinetobacter Baumannii"</i> Coordinatore: Prof. Robert Bonomo, Case Western Reserve University, Cleveland (Ohio, USA) Responsabile locale: Prof. Prati Fabio – Ruolo: <i>Key Personnel</i> – Importo: US\$ 226.045,00 (quota UNIMORE)
Giu 2010-Mag 2015	National Institute of Health (USA), 2 R01 AI063517-06A1 <i>"Challenges in beta-Lactamase Mediated Resistance"</i> Coordinatore: Prof. Robert Bonomo, Case Western Reserve University, Cleveland (Ohio, USA). Responsabile locale: Prof. Prati Fabio – Ruolo: <i>Key Personnel</i> – Importo: US\$ 200.000,00 (quota UNIMORE)
Mar 2011-Feb 2014	National Institute of Health (USA), 1R15AI094489-01 <i>"Mapping the binding site of class D beta-lactamase enzymes for inhibitor design"</i> Coordinatore: Prof. Rachel Powers, Grand Valley State University (MI, USA). Responsabile locale: Prof. Prati Fabio – Ruolo: <i>Key Personnel</i> – Importo: US\$ 319.823 (complessivi)
Apr 2010-Mar 2014	National Institute of Health (USA), GM63815 <i>"Structure, Function and Inhibition of beta-Lactamases III"</i> Coordinatore: Prof. B. Shoichet, University of California, San Francisco. Responsabile locale: Prof. Prati Fabio – Ruolo: <i>Key Personnel</i> – Importo: US\$ 46.000,00/anno

Dic 2008-Nov 2010	Fondazione Cassa di Risparmio di Modena, bando Progetti di Ricerca Internazionale 2007. "Resistenza agli antimicrobici: comprensione del meccanismo per i ceppi emergenti sul territorio di Modena e studio di possibili nuovi antibiotici". Coordinatore: Prof Fabio Prati. – Importo: Euro 61.530,33
Ott 2008-Sett 2010	MIUR, COFIN2007. "Reattività, sintesi stereoselettive e applicazioni di composti organici contenenti boro o fosforo". Coordinatore: Prof. O. Attanasi, Università di Urbino. Responsabile locale: Prof Fabio Prati – Importo: Euro 71.964 (228.000 Euro totale)
Ago 2005-Mar 2010	National Institute of Health (USA), GM63815 "Structure, Function and Inhibition of beta-Lactamases II" Coordinatore: Prof. B. Shoichet, University of California, San Francisco. Responsabile locale: Prof. Prati Fabio – Ruolo: <i>Partecipante</i> – Importo: US\$ 39.000,00/anno
Sett 2004-Ago 2009	National Institute of Health (USA), 1 RO1 AI063517-01 "Ceftazidime Resistance in SHV beta-Lactamases" Coordinatore: Prof. Robert Bonomo, Case Western Reserve University, Cleveland (Ohio, USA). Responsabile locale: Prof. Prati Fabio – Ruolo: <i>Partecipante</i> – Importo: US\$ 200.000,00 (quota UNIMORE)
Dic 2005-Dic 2007	MURST, COFIN2005. "Sintesi stereoselettive e caratterizzazione strutturale di composti eterociclici ossigenati" Coordinatore: Prof. D. Spinelli, Università di Bologna Responsabile locale: Prof Giovanni Torre – Importo: Euro 100.00 (228.000 Euro totale)
Ago 2003-Lug 2005	National Institute of Health (USA), GM63815 "Structure, Function and Inhibition of beta-Lactamases II" Coordinatore: Prof. B. Shoichet, University of California, San Francisco. Responsabile locale: Prof. Prati Fabio – Ruolo: <i>Partecipante</i> – Importo: US\$ 34.650/anno

#### Attività Accademica ed Impegni Istituzionali

Da A.A. 2015/2016 ad A.A. 2022/2023	Docente di Chimica Organica (12 CFU, 96 ore), nel corso di Laurea magistrale in Farmacia, Dipartimento di Scienze della Vita, Università di Modena e Reggio Emilia
Da A.A. 2019/2020 ad A.A. 2023/2024	Docente di Laboratorio di Chimica Organica (2 CFU, 16 ore), nel corso di Laurea in Scienze Biologiche. Il corso è stato tenuto a distanza per emergenza Covid i primi due anni, e successivamente suddiviso in tre turni
A.A. 2009/2010 A.A. 2008/2009	Attività di supporto alla Didattica di Chimica Organica, nel corso di Laurea magistrale Chimica e Tecnologia Farmaceutica (20 ore di Esercitazioni, primo anno), Dipartimento di Farmacia, Università di Modena e Reggio Emilia.
A.A. 2001/2002 A.A. 2000/2001	Attività di supporto alla Didattica di Chimica Organica, nel corso di Laurea magistrale Chimica e Tecnologia Farmaceutica (20 ore di Esercitazioni, primo anno), Dipartimento di Farmacia, Università di Modena e Reggio Emilia.

## Indici Bibliometrici

Co-autrice di 46 articoli peer reviewed in giornali internazionali di chimica organica, chimica farmaceutica e chimica generale. Co-inventore di 5 brevetti internazionali. La produzione scientifica è riassunta dai seguenti indici bibliometrici:

H-index (Scopus)	24
Citazioni (Scopus)	2392
Supervisor laureandi e dottorandi	Sono stata correlatrice di svariate tesi di laurea di studenti di Chimica, Chimica e Tecnologia Farmaceutica e Farmacia, nonché di dottorandi di ricerca

## Competenze Strumentali

Uso corrente	NMR, GPC-SEC, HPLC-UV, HPLC-MS, IR, Polarimetro
--------------	---

## Competenze Informatiche

Sistema Operativo	macOS, Win 10
Software	Chem Office, Sci Finder, Cross Fire–Reaxys Beilstein, MestReNova, MS Office.

## Lingue Straniere

Italiano	Lingua Madre
Inglese	Fluente

## Trasferimento Tecnologico

Sono co-titolare di 5 brevetti internazionali tutti incentrati sulle proprietà di inibizione delle  $\beta$ -lattamasi delle diverse classi di acidi boronici sintetizzate. Il primo brevetto PCT pubblicato nel 2002 è stato depositato insieme al Prof. B. K. Shoichet e copriva gli  $\alpha$ -acilamminoboronici come inibitori di  $\beta$ -lattamasi. In quel periodo gli acidi boronici erano ritenuti dall'industria farmaceutica molecole non utili in quanto a rischio tossicità a causa dell'elevata elettrofilia del Boro che induceva a pensare a una sua mancanza di selettività. Successivamente, in parte a causa dell'ingigantirsi del problema delle resistenze batteriche e in parte per la scarsità di soluzioni a disposizione, gli acidi boronici sono stati sottoposti a indagini più approfondite, anche grazie agli ottimi risultati ottenuti nei gruppi di ricerca che studiavano queste molecole. Il nostro sforzo in tal senso è stato ulteriormente rinforzato con due brevetti pubblicati nel 2013, uno in collaborazione sempre con il Prof Shoichet sugli acidi  $\alpha$ -solfonammidoboronici, e il secondo fatto all'interno di uno spin off accademico "TheraBor Pharmaceutical" che la sottoscitta e il Prof. F. Prati avevano attivato insieme a due manager esterni. Tuttavia, la possibilità di sviluppare le nostre molecole ci è stata preclusa dalla difficoltà di reperire i finanziamenti necessari a terminare quantomeno la fase preclinica. Abbandonato dunque lo spin off, la nostra ricerca in questa direzione non si è comunque fermata: un quarto brevetto in collaborazione con i Prof R. A. Bonomo è stato pubblicato nel 2017 e altri due sono attualmente in fase di predisposizione visti gli ottimi risultati anche *in vivo* sui topi in modelli di infezione anche polmonare di alcune nuove molecole. Il sempre maggiore interesse sulle molecole che contengono il gruppo boronico in campo farmaceutico, è testimoniata dall'approvazione nel 2017 da parte della FDA (Food and Drug Administration) della combinazione di un carbapenemico (Meropenem) con un acido boronico (Vaborbactam) per il trattamento di complicate infezioni

del tratto urinario (cUTIs) causate da *Escherichia coli*, *K. pneumoniae*, and *Enterobacter cloacae*. Vaborbactam è anch'esso un acido  $\alpha$ -acilamminoboronicico e la sua struttura presenta molte caratteristiche della classe di molecole coperte dal nostro primo brevetto, in particolare della molecola SM23.

