

## TITOLI DI STUDIO

Set. 2010 Doctor of Philosophy in Chemistry (Dottorato di ricerca in Chimica) conseguito nel 2010 presso il Dipartimento di Chimica della University of Warwick (Inghilterra) con tesi dal titolo "Modelling Techniques for the study of Molecular Self-Organisation" (tecniche di modellazione per lo studio dell'auto-organizzazione molecolare) riconosciuto equipollente al titolo di Dottore di Ricerca ai sensi del DPR 11 luglio 1980, n. 382 con decreto MIUR, Prot.n.0000506 - 14/03/2017.

Nov. 2006 Laurea vecchio ordinamento in Chimica, Università degli Studi di Trieste, IT

**ASN FASCIA I** 02/D1 - FISICA APPLICATA, DIDATTICA E STORIA DELLA FISICA (sc. 11/01/2035)  
05/E1 - BIOCHIMICA GENERALE (sc. 06/02/2035)

**ASN FASCIA II** 02/B2 - FISICA TEORICA DELLA MATERIA (sc. 30/05/2034)  
03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE (sc. 01/06/2034)  
03/B1 - FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI (sc. 03/10/2034)  
03/B2 - FONDAMENTI CHIMICI DELLE TECNOLOGIE (sc. 13/04/2033)

## POSIZIONE ATTUALE

da Ott. 2025 - ricercatore a tempo determinato, Dipartimento di scienze matematiche, informatiche e fisiche, Università degli Studi di Udine  
*Tipo contratto:* RTD L. 240/2010 art. 24, c. 3, lett. b

## PREGRESSA ATTIVITÀ DI FORMAZIONE E RICERCA PRESSO QUALIFICATI ISTITUTI ITALIANI O STRANIERI

Nov. 2023 - Consulente sviluppo software scientifico (Product Manager)  
Ott. 2024 Cresset, Cambridge, UK

Nov. 2021 - Collaboratore di Ricerca (gruppo Walter Rocchia) e Responsabile di progetto di  
Nov.2023 ricerca, Istituto Italiano di Tecnologia (IIT), Genova, IT

*Tipo contratto:* contratto di collaborazione

*Titolo Progetto:* Computational design of theragnostic nanobodies: targeting missense mutants in metastatic breast cancer cells (**Progettazione computazionale di frammenti di anticorpo per la teragnostica: bersagliare mutanti missensi nelle cellule di carcinoma mammario metastatico**) finanziato da AIRC - Associazione Italiana per la ricerca sul cancro (2021-2025, Responsabile Scientifico: S. Fortuna)

Nov. 2018 - ricercatore a tempo determinato, Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università degli Studi di Trieste

*Tipo contratto:* RTD L. 240/2010 art. 24, c. 3, lett. b

Nov. 2017 - assegnista (gruppo Silvano Geremia) e responsabile di progetto, Dipartimento di  
Nov. 2018 Scienze Chimiche e Farmaceutiche dell'Università degli Studi di Trieste

*Tipo contratto:* assegno di ricerca L.240/2010

*Titolo Assegno:* **Design computazionale di nuovi leganti per il riconoscimento di proteine** *Titolo Progetto:* Computational design of customised nanobodies for oncology applications: prognostic candidates for HER2 as first case (**Disegno computazionale di frammenti di anticorpo personalizzati per applicazioni oncologiche: candidati prognostici per HER2 come primo esempio**) finanziato da AIRC - Associazione Italiana per la ricerca sul cancro (2017-2020, Responsabile Scientifico: S. Fortuna)

Apr. 2016 - assegnista/responsabile progetto Talents3 (gruppo Ario de Marco e gruppo Alessandro Laio), University of Nova Gorica, Slovenia & SISSA, Trieste, IT

Set. 2017 *Tipo contratto:* assegno di ricerca L.240/2010

*Titolo Assegno/Progetto:* Computational design of customised nanobodies for biotechnological appli-

cations: the optimisation of stable humanised, high affinity therapeutic candidates for HER2 as first test case (**Design computazionali di frammenti di anticorpo personalizzati per applicazioni biotecnologiche: l'ottimizzazione di candidati terapeutici stabili, umanizzati, e ad alta affinità per HER2 come primo esempio**) finanziato da Area Science Park, IT, Fondo Sociale Europeo - Programma Operativo Regionale 2014/2020 (proposal NB4HER2, 2016-2017 Responsabile Scientifico: S. Fortuna)

Nov. 2013 -  
Mar. 2016

assegnista (gruppo Giacinto Scoles), Dipartimento di Scienze Mediche e Biologiche dell' Università degli Studi di Udine

*Tipo contratto:* assegno di ricerca L.240/2010

*Titolo Assegno:* **Modellazione Multiscala per lo sviluppo di nuovi nanodispositivi basati sui peptidi** finanziato da 7FP, Ideas, ERC Advanced Grant: Molecular Nanotechnology For Life Science Application: QUantitative Interactomics for Diagnostics, Proteomics and QUantitative Oncology (NAnotecnologie molecolari per applicazioni in scienze della vita: interactomica quantitativa per la diagnostica, proteomica, o oncologia quantitativa), (Quidroquo) (proposal n. 269025, 2011-2016 Responsabile Scientifico: G. Scoles)

Ott. 2012 -  
Set. 2013

assegnista (gruppo Giacinto Scoles), Dipartimento di Scienze Mediche e Biologiche dell' Università degli Studi di Udine

*Tipo contratto:* assegno di ricerca L.240/2010

*Titolo Assegno:* Molecular Simulations for Nanomedicine (**Simulazioni Molecolari per la nanomedicina** finanziato da AIRC 5x1000 Special program 2011: Application of advanced Nanotechnology in the development of Cancer Diagnostics tools (Applicazioni di nanotecnologia avanzata per lo sviluppo di strumenti diagnostici per il cancro) (Rif. 12214, 2012-2014, Responsabile Scientifico: G. Toffoli, Co-Responsabile Scientifico: G. Scoles)

Ott. 2010 -  
Sept. 2012

assegnista (gruppo Stefano Fabris), CNR-IOM e Sissa, Trieste, IT

*Tipo contratto:* assegno di ricerca Art. 51, comma 6, legge n. 449 del 27/12/1997

*Titolo Assegno:* **Spettroscopia Computazionale di nanostrutture metallo-organiche autoassemblate du superfici metalliche** finanziato da PRIN - MIUR, IT: Controlling the structure and function of metallorganic nanostructures on metal surfaces (2010-2013, Responsabile Scientifico: M.G. Betti, Co-Responsabile Scientifico: S. Fabris)

Mar. 2007 -  
Lug. 2010

Studente di Dottorato (Relatore: Prof. A. Troisi), Dipartimento di Chimica e Centro per il Calcolo Scientifico, University of Warwick, UK

*Titolo Progetto:* Modelling Techniques for the study of Molecular Self-Organisation (**Tecniche di modellazione per lo studio della auto-organizzazione molecolare**) finanziato da The Leverhulme Trust: Agent Based Modeling of molecular self-organization (2007-2010, Responsabile Scientifico: A. Troisi)

## PARTECIPAZIONE A SOCIETÀ SCIENTIFICHE

Membro commissione di IOP Liquids and Complex Fluids Group (2015-2019)

Membro Associato di Institute of Physics (IOP, 2008-2020)

Membro Associato di Royal Society of Chemistry (RSC, 2008-2020)

Membro di European Physical Society (EPS, 2017-2020)

Membro di Biochemical Society (2017-2020)

## ORGANIZZAZIONE DI CONVEGNI/CONGRESSI

2017

Organizzatore

IOP Workshop: Self-Assembly, Recognition and Applications (SARA) 2017

14 Dic.2017, Lincoln, UK

2016

Organizzatore

IOP Workshop: **Self-Assembly, Recognition and Applications (SARA) 2016**

9 Dic.2016, Edimburgh, UK

## ATTIVITÀ DI REVISIONE TRA PARI (PEER REVIEW)

PREMI IOP Liquids and Complex Fluids Group

RIVISTE SCIENTIFICHE J. Chem. Theory Comput., J. Phys. Chem. B/C/Lett, ACS Chem. Neurosci., ACS Comb. Sci., J. Chem Inf. Model. (ACS), Int. J. Biol. Macromol., Surf. Sci., J. Mol. Struct. (Elsevier), J. Biomol. Struct. Dyn. , Free Radic. Res. (Taylor & Francis), Microb. Cell. Fact. (BioMed Central), Int. J. Mol. Sci. (MDPI), Sci. Rep. (Springer Nature).

FINANZIAMENTI PER LA RICERCA Sono referee scientifico per i seguenti consigli nazionali della ricerca:

- National Research Foundation of South Africa (NRF, 2015-2017)
- Irish Research Council (2017-)
- National Science Center, Poland (Narodowe Centrum Nauki, NCN, 2019-)
- Ministry of Education, University, and Research, Italy (MIUR, 2019 -)
- CINECA, Italy (2022 - )

## Finanziamenti - Direzione, coordinamento, e partecipazione a gruppi di ricerca

---

### DIREZIONE/COORDINAMENTO DI GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI

- 2021-2024 *Titolo Progetto:* Computational design of theragnostic nanobodies: targeting missense mutants in metastatic breast cancer cells (**Progettazione computazionale di frammenti di anticorpo per la teragnostica: bersagliare mutanti missensi nelle cellule di carcinoma mammario metastatico**) finanziato da AIRC - Associazione Italiana per la ricerca sul cancro (2021-2025, Responsabile Scientifico: S. Fortuna) - Investigator Grant (IG), 409.000 euro - 5 anni
- 2021-2022 *Titolo Progetto:* De-novo engineered antibody fragments: validation of the first in-silico pipeline for antibody discovery (**Ingegnerizzazione de-novo di frammenti di anticorpo: validazione della prima pipeline in silico per la scoperta di anticorpi**) finanziato da Alternatives Research & Development Foundation - ARDF (US) (2021-2022 Responsabile Scientifico: S. Fortuna) - Annual Open Grant, 40.000 euro - 1 anno
- 2019-2020 *Titolo Progetto:* In silico design of customised high-affinity antibody fragments (**Design in silico di frammenti di anticorpo ad alta affinità**) finanziato da Alternatives Research & Development Foundation - ARDF (US) (2021-2022 Responsabile Scientifico: S. Fortuna) - Annual Open Grant, 39.980 euro - 1 anno
- 2017-2020 *Titolo Progetto:* Computational design of theragnostic nanobodies: targeting missense mutants in metastatic breast cancer cells (**Progettazione computazionale di frammenti di anticorpo per la teragnostica: bersagliare mutanti missensi nelle cellule di carcinoma mammario metastatico**) finanziato da AIRC - Associazione Italiana per la ricerca sul cancro (2021-2025, Responsabile Scientifico: S. Fortuna) - My First Airc Grant (MFAG), 225.000 euro - 3 anni
- 2017 *Titolo Progetto:* Computational design of bidentate binders of increased affinity and selectivity (**Design computazionale di leganti bidentati ad alta affinità e selettività**) finanziato da The Royal Society of Chemistry (UK) (Responsabile Scientifico: S. Fortuna) - Research Fund, 2800 sterline - 1 anno
- 2016-2017 *Titolo Progetto:* Computational design of customised nanobodies for biotechnological applications: the optimisation of stable humanised, high affinity therapeutic candidates for HER2 as first test case (**Design computazionali di frammenti di anticorpo personalizzati per applicazioni biotecnologiche: l'ottimizzazione di candidati terapeutici stabili, umanizzati, e ad alta affinità per HER2 come primo esempio**) finanziato da Area Science Park, IT, Fondo Sociale Europeo - Programma Operativo Regionale 2014/2020 (proposal NB4HER2, 2016-2017 Responsabile Scientifico: S. Fortuna) - 52,380€ - 18 mesi

### PARTECIPAZIONE A GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI

- 2022-2026 *Titolo Progetto:* STOP SPREAD BAD BUGS: novel antimicrobial approaches to combat multidrug resistance in bacteria (**Nuovi approcci antimicrobici per combattere la resistenza multifarmaco nei batteri**) finanziato dalla Commissione Europea nell'ambito di HORIZON2020 - Marie Skłodowska-Curie Innovative Training Networks (MSCA-ITN-2021), 4.028.713,19 euro - 4 anni
- 2021-2023 *Titolo Progetto:* Targeting bacterial cell envelope of Nosocomial pathogens to ES-KAPE resistance (**Bersagliare le membrane batteriche dei patogeni nosocomiali per sfuggire alla resistenza**) finanziato dal MIUR - PRIN 2020 (Under 40), 489,928€ - 3 anni
- 2021-2023 *Titolo Progetto:* Sustainable route for circularity of renewable polyesters (RenEcoPol) (**Percorsi circolari sostenibili per poliesteri rinnovabili**) finanziato dalla Commissione Europea nell'ambito di HORIZON2020 - Marie Skłodowska-Curie Individual

Fellowships (MSCA-IF-2020), Beneficiario: A.Todea, Supervisore: L. Gardossi - 2 anni

2020-2024 *Titolo Progetto:* Heterogenous biocatalytic reaction cascades training network (INTERfaces) (**Training network per le reazioni biocatalitiche eterogenee a cascata**) finanziato dalla Commissione Europea nell'ambito di HORIZON2020 - Marie Skłodowska-Curie Innovative Training Networks (MSCA-ITN-EID-2020), 3.709.260€-4 anni

2007-2016 Negli anni precedenti ho partecipato a gruppi di ricerca caratterizzati da collaborazioni nazionali (finanziati da Leverhulme, PRIN, e AIRC) e internazionali (ERC) nell'ambito della mia *Pregressa attività di formazione e ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri* - come indicato in calce ad ogni esperienza.

#### **PREMI E RICONOSCIMENTI NAZIONALI E INTERNAZIONALI PER ATTIVITÀ DI RICERCA E ALTRI FINANZIAMENTI**

Giu. 2016 The Royal Society of Chemistry: Small Grant for Scientific Activities (£732)  
Apr. 2016 ERASMUS+ (600€)  
Mar. 2016 The Royal Society of Edinburgh e Accademia Nazionale dei Lincei (1,000€)  
Giu. 2014 The Royal Society of Edinburgh e Accademia Nazionale dei Lincei (1,600€)  
Ott. 2012 SISSA young scientists competition (10,000€)  
Giu. 2011 SISSA young scientists competition (6,000€)  
Lug. 2009 due borse di studio per partecipazione a conferenze (IUPAC conference, £95 and Faraday Discussion, £150)  
Lug. 2006 borsa di studio per partecipazione a scuola estiva presso University of Illinois, US (700€)

#### **DIREZIONE/COORDINAZIONE PROGETTI DI RICERCA COMPUTAZIONALI NAZIONALI ED EUROPEI**

Dal 2010 sono stata responsabile scientifico di 16 progetti computazionali nazionale del CINECA, e un progetto europeo ( PRACE - Partnership for Advanced Computing in Europe), coordinando gli associati gruppi di ricerca.

Apr. 2020 - Apr. 2021 CINECA-ISCRA Class B proposal (576,000 GPU hours on M100@CINECA)  
**Computational design of highly specific nanobodies for HER2 isoforms recognition**

Nov. 2019 - Ago. 2020 CINECA-ISCRA Class C proposal (36,000 GPU hours on Marconi@CINECA)  
**Targeting the sigma-1 receptor with diazepam scaffold based molecules**

May. 2019 - Feb. 2020 CINECA-ISCRA Class C proposal (33,600 GPU hours on Marconi@CINECA)  
**Computational design of peptides for capturing beta-2-microglobulin**

Jul. 2018 - Apr. 2019 CINECA-ISCRA Class C proposal (40,000 GPU hours on Marconi@CINECA)  
**Ex-novo optimisation of antibodies fragments**

Feb. 2018 - May 2019 CINECA-ISCRA Class B proposal (480,000 GPU hours on Marconi@CINECA)  
**Computational design of customised nanobodies for HER2 recognition**

Nov. 2017 - Aug. 2018 CINECA-ISCRA Class C proposal (40,000 GPU hours on Marconi@CINECA)  
**Computational design of peptides for lysozyme recognition**

May. 2017 - Feb. 2018 CINECA-ISCRA Class C proposal (38,400 GPU hours on Marconi@CINECA)  
**Scoring functions assessment for nanobodies screening**

Jul. 2016 - Apr. 2017 CINECA-ISCRA Class C proposal (50,000 GPU hours on Marconi@CINECA)  
**Predicting the properties of peptoids by molecular dynamics simulations**

Nov. 2015 - Dec. 2015 PRACE Preparatory Access (5000 MIC hours on Marenstrum, Spain + 50000 GPU hours on Curie, France) **Effect of humanizing mutations on natural nanobodies for the development novel therapeutic agents**

Aug. 2015 - May 2016 CINECA-ISCRA Class C proposal (100,800 GPU hours on Galileo@CINECA)  
**Effect of humanising mutations on natural nanobodies for the development novel therapeutic agents**

Sep. 2014 - Jul. 2015 CINECA-ISCRA Class C proposal (48,000 GPU hours on Eurora@CINECA)

**Identification of chemokine receptor/ligand binding configurations for the development enhanced binders for biomolecular recognition**

<i>Jul. 2013 - Apr. 2014</i>	CINECA-ISCRA Class C proposal (1,000,000 CPU hours on Fermi@CINECA) <b>Scoring functions Assessment for the development of new peptide-based nanodevices</b>
<i>Oct. 2012 - Oct. 2013</i>	CINECA-ISCRA Class B proposal (3,609,600 CPU hours on Fermi@CINECA) The GW method for the accurate simulation of the photoemission spectra of metal supported metal-phthalocyanine self-assemblies
<i>Oct. 2012 - Jul. 2013</i>	CINECA-ISCRA Class C proposal (1,998,850 CPU hours on Fermi@CINECA) Self-assembled monolayers for the decoupling of molecules from their metallic substrate
<i>Dec. 2011- Dec. 2012</i>	CINECA-ISCRA Class B proposal (161,280 CPU hours on SP6@CINECA): Molecule-substrate interplay and spectroscopic properties of metal-supported metal-phthalocyanine
<i>Sep. 2011 - Jun. 2012</i>	CINECA-ISCRA Class C proposal (20,000 CPU hours on SP6@CINECA) DFT methods for the study of metal phthalocyanine
<i>Dec. 2010 - Sep. 2011</i>	CINECA-ISCRA Class C proposal (20,000 CPU hours on SP6@CINECA) Metalphthalocyanine self-assemblies on metallic surfaces

## Attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero

---

### INSEGNAMENTO IN CORSI DI PRIMO, SECONDO, TERZO LIVELLO

(A.A. = anno accademico)

- A.A. 2025/2026 docente titolare dell'insegnamento di Fisica per IoT (60 ore) nel CdLM in Internet of Things (IoT) Dipartimento di scienze matematiche, informatiche e fisiche, Università degli Studi di Udine.  
*Tipo contratto:* RTD-B L.240/2010
- A.A. 2024/2025 docente per la lezione "Modelling and visualization of NDO/AMP, proteins, and bacterial membranes" (2 ore) per dottorandi dell'ITN training network "SSBB - Stop Spread Bad Bugs" (progetto Horizon 2020), SSBB PhD training, Siena, Italy, 17 Sept. 2025.
- A.A. 2020/2021 docente titolare per il ciclo di seminari curriculari "Molecular Modelling for Life Sciences" (16 ore) nell'ambito del Dottotato in CHIMICA, Università degli Studi di Trieste.  
*Tipo contratto:* RTD-B L.240/2010
- A.A. 2020/2021 docente titolare dell'insegnamento di Analisi dei Medicinali (128 ore) nel CdLM Farmacia del Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università degli Studi di Trieste.  
*Tipo contratto:* RTD-B L.240/2010
- A.A. 2019/2020 docente titolare per il ciclo di seminari curriculari "Molecular Modelling for Life Sciences" (16 ore) per dottorandi dell'ITN training network "INTERfaces" (progetto Horizon 2020) iscritti al Dottotato in CHIMICA dell'Università degli Studi di Trieste.
- A.A. 2019/2020 docente co-titolare dell'insegnamento di Analisi dei Medicinali (60 ore, modulo pratico, Farmacia) nel CdLM in Farmacia del Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università degli Studi di Trieste. (nota: primo semestre emergenza Covid).  
*Tipo contratto:* RTD-B L.240/2010
- A.A. 2019/2020 docente titolare dell'insegnamento di Principi di Modellazione Molecolare (32 ore) nel CdLM in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche (CTF) del Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università degli Studi di Trieste.  
*Tipo contratto:* RTD-B L.240/2010
- A.A. 2016/2017 docente esterno per l'insegnamento Basics in Molecular Biology and Biotechnology (2 ore) nell'ambito del dottorato di ricerca in Molecular Genetics and Biotechnology presso University of Nova Gorica, Slovenia.
- A.A. 2015/2016,  
2016/2017,  
2017/2018 docente titolare dell'insegnamento di Idoneità informatica Pratica (48) nel CdLM in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche (CTF) del Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università degli Studi di Trieste.  
*Tipo contratto:* COR2 - Contratto Docenza L. 240/2010 c. 2, art. 23
- A.A. 2013/2014,  
2015/2016,  
2016/2017,  
2017/2018 docente titolare dell'insegnamento di Idoneità informatica Pratica (88 ore) nel CdLM

in Farmacia del Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università degli Studi di Trieste.

*Tipo contratto:* COR2 - Contratto Docenza L. 240/2010 c. 2, art. 23

A.A. 2008/2009,  
2009/2010

Assistenza/tutoraggio per le esercitazioni pratiche nel CdL in Chimica (Dipartimento di Chimica, University of Warwick, UK) per gli insegnamenti di: (i) Matematica, (ii) Meccanica statistica, (iii) Chimica Computazionale



**ATTIVITÀ DI SUPERVISIONE - MEMBRI INTERNI DEL GRUPPO DI RICERCA (STUDENTI/BORSISTI/ASSEGNISTI):**

- Federico Nolasco (studente di dottorato, Nov.2021 - Nov.2024)  
Progetto: *Characterisation of antibody fragments*
- Patricio German Barletta (borsista ICTP-TRIL, Ago.2021 -Ago.2023)  
Progetto: *In silico design of customised high-affinity antibody fragments*
- Marco De Conto (stagista)  
Progetto: *Computational design of biotheranostics*
- Theo Battista (assegnista, Lug.2021 - Giu. 2022)  
*Expression and purification of antibody fragments for oncology applications*
- Nikola Minovski (assegnista, Mar. 2020 - Feb. 2021)  
*In silico design of customised high-affinity antibody fragments*
- Hendrik Vondracek (assegnista, Nov. 2019 - Feb. 2021)  
*Atomic Force Microscopy (AFM) and electrochemical measurements*
- Barbara Medagli (assegnista, Ott. 2017 - Set. 2020)  
*Expression and purification of antibody fragments for oncology applications*
- Luciana Gneo (assegnista, Dic. 2017 - Mag. 2019)  
*Characterisation of antibody fragments for oncology applications (AFM)*
- Cedrix Dongmo (borsista ICTP-TRIL, Gen. 2014 - Ott. 2014)  
*Molecular Dynamics simulations of biomolecules*

**(Co)RELATORE DI TESI DI LAUREA E DOTTORATO**

- 2022
- Marco De Conto (CdLM in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche) University of Trieste, Trieste, Italy  
Thesis: *In silico design of antibody fragments for (bio)molecular detection and theragnostic applications: the example of p53 reactivation*
- 2021
- Damiano Baroni (CdLM in Chimica), University of Trieste, Trieste, Italy  
Thesis: *Computational Methods for the rational mutagenesis of cutinaes*
  - Sara Raso (CdLM in Biotecnologie MEDiche e Farmaceutiche)  
Thesis: *Dall'ottimizzazione in silico alla provetta: produzione, caratterizzazione di nanobody e test preliminari su linee cellulari di carcinoma mammario Her2 positive come nuova prospettiva per il cancro al seno*
- 2017
- Katja Pracek (BSc Bioinformatics), University of Primorska, Koper, Slovenia  
Thesis: *Homology modeling and molecular simulations of the camelid nanobodies as therapeutic tools in the treatment of sarcoma*

**MEMBRO ESTERNO COMMISSIONE GIUDICATRICE TESI DI DOTTORATO:**

- 2019
- Ornela Maloku, PhD program in Computer science, Mathematics and Physics, University of Udine, Italy
- 2018
- Nikhil Agrawal, School of Pharmacy and Pharmacology, University of KwaZulu-Natal, Durban, South Africa

## Terza Missione

---

### ATTIVITÀ DI DIVULGAZIONE SCIENTIFICA

- 2017 Partecipazione come relatore a "Pint of Science" (Trieste, 17/05/2017)
- 2011-2013 2 articoli divulgativi
1. S. Fortuna\*, P. Gargiani, M.G. Betti, C. Mariani, A. Calzolari, S. Modesti, S. Turchini, N. Zema, and S. Fabris  
**Formation of hybrid electronic states in FePc chains mediated by the Au(110) surface**  
*Elettra Highlights 2012-2013, pp.76-77.*
  2. S. Fortuna  
**Autoorganizzazione molecolare e le tecnologie del futuro (Molecular-self-organisation and the future technologies)**  
*September 2011, 451 magazine, Italian collaborator of The New York Review of Books*  
<http://www.451online.it>
- 2011-2013 Dimostrazioni scientifiche ai seguenti eventi aperti al pubblico:
1. "UniStem" (UniUD, 15/03/2013),
  2. "La Notte dei Ricercatori" - "The Night of the Researchers" (Udine 27/09/2013)
  3. "La Notte dei Ricercatori" - "The Night of the Researchers" (Trieste, 23/09/2011)
- 2009 partecipazione al corso "Dealing with the media" organizzato da Warwick University, UK.
- DAL 2009- Multiple press releases (per i papers in collaboration with Dr.Ir.S.A.F.Bon, per il premio "SISSA young scientists competition" e per grant AIRC)
- 2007 Visite guidate del sincrotrone Elettra, Trieste per "Elettra Open Days" (Trieste 2007)
- 2006 Visite guidate dei sincrotrone Elettra, Trieste per "Elettra Open Days" (Trieste 2006)

### ATTIVITÀ ISTITUZIONALI

- 2020-2021 docente tutor per i disabili del Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università degli Studi di Trieste
- 2020-2021 membro della Commissione istituita dai CdS in Farmacia e CTF per le disabilità, Università degli Studi di Trieste

## Attività di relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali

---

- (19) **INVITED TALK:** ....  
Giacinto Scoles: the Scientist, the Man - A symposium to celebrate his scientific journey  
ICTP - International Centre for Theoretical Physics, Trieste, Italy (17 - 19 Nov. 2025)
- (18) **INVITED TALK:** *Affinity Maturation*  
Nanobodies Workshop: Binder Recovery by In Silico and In Vitro Panning  
University of Nova Gorica, Slovenia (22 - 26 Sep. 2025)
- (17) **INVITED TALK:** *La "costruzione" degli anticorpi monoclonali*  
XLVIII Congresso Nazionale SINP (Società Italiana di Neurologia Pediatrica)  
Bari, Villa Romanazzi Carducci, Italia (12 - 14 Dec. 2024)
- (16) *A computational protocol for the in silico maturation of antibody fragments*  
European Biophysical Societies' Association Global Summit - EBSA 2023  
Stockholm, Sweden (31 Jul. - 4 Aug. 2023)
- (15) *Automatic screening of enzymes for synthesis and biodegradation of renewable polyesters*  
COZYME - Computational Redesign of Enzymes Meeting - Fuengirola, Spain (March 20, 2023)
- (14) *A Computational Protocol for the in Silico Maturation of Antibody Fragments*  
CLINAM 12/2020 Conference and Exhibition: European & Global Summit for Cutting-Edge Medicine  
Basel, Switzerland (25-28 Oct. 2020).
- (13) *Computational design of peptide based architectures for biomarker recognition*  
CLINAM 9/2016 Conference and Exhibition: European & Global Summit for Cutting-Edge Medicine  
Basel, Switzerland (26-29 Jun. 2016).
- (12) *Self-organisation of surface adsorbed molecular monolayers: does the surface matter?*  
Nanomaterials for Technology Workshop - Department of Chemical and Process Engineering, University of Strathclyde, Glasgow, UK (20-21 Jun. 2016).
- (11) *Computational design of peptide-based architectures for protein recognition*  
IOP Conference: The Physics of Soft and Biological Matter 2016  
Cambridge, UK (6-8 Apr. 2016).
- (10) **INVITED TALK:** *Computationally engineered binders for protein recognition*  
Workshop in honor of Giacinto Scoles: From Intermolecular Forces to Frontiers in Nanoscience and Nanomedicine - ICTP, Trieste, Italy (21-22 Jan. 2016).
- (9) *Computational design of peptide based binders for biomarker recognition*  
EMBO Workshop: Advances in Protein-Protein Interaction Analysis Modulation  
Hyères, France (9-12 Sep. 2014).
- (8) *Structure of self-assembled iron-phthalocyanines on the Au(110) surface through STM imaging and DFT calculations*  
Science through Scanning Probe Microscopy - Bologna, Italy (12-13 Dec. 2013).
- (7) *Structure and electronic properties of self-assembled transition metal phthalocyanines (M=Fe,Co,Ni,Cu,Zn) on the Au(110) surface*  
CMD-24, ECOSS-29, ECSCD-11, CMMP-12  
Edinburgh International Conference Centre, Edinburgh, UK (3-7 September 2012).
- (6) **INVITED TALK:** *Self-organisation of surface adsorbed molecular monolayers: an agent-based view*  
Thomas Young Centre workshop: Thermodynamics and Kinetics of Surfaces and Interfaces from Simulations - University College London, UK (22-24 Jun. 2011).
- (5) *Agent Based modelling of realistic molecules*  
ECCS'10 European Conference on Complex Systems  
Lisbon, Portugal (13-17 Sep. 2010).
- (4) **INVITED TALK:** *Monte Carlo simulation of polydisperse spheres on a spherical droplet*  
CCP5 Workshop: Particle Adsorption at Soft Interfaces  
University of Warwick, UK (8 Jul. 2010).
- (3) *Agent Based algorithm for the study of molecular self-organisation*  
European Conference on Complex Systems - University of Warwick, UK, (21-25 Sep. 2009).
- (2) *Agent Based modelling for molecular self-organisation*  
European Dynamics Days 2009 - Göttingen, Germany (31 Ago. - 4 Sep. 2009).
- (1) *Agent Based algorithm for the study of molecular self-organisation*  
EPSRC Network Mathematical Challenges of Molecular Dynamics  
University of Bath, UK (13-15 Jul. 2009).

## Seminari a Invito

---

Sono stata invitata a dare i seguenti seminari presso le seguenti istituzioni nazionali/internazionali:

- (17) *A computational protocol for the in silico maturation of antibody fragments* - IFOM (the AIRC Institute of Molecular Oncology), Milan, Italy, (20 March 2025).
- (16) *Computational design of peptide-based architectures for protein recognition* - Department of Physics, University of Lisboa, Portugal (9 October 2019).
- (15) *Computational design of peptide-based architectures for protein recognition* - Department of Computational Biochemistry and Drug Design, Kemijski inštitut (KI) - National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenia (21 Mag. 2018).
- (14) *Computational design of peptide-based architectures for protein recognition* - Department of Biological Sciences and Engineering, University of Nova Gorica, Vipava, Slovenia (16 Mag. 2017).
- (13) *Computational design of peptide-based architectures for protein recognition* - Faculty of Chemistry, University of Murcia, Spain (20 Mag. 2016).
- (12) *Computational design of peptide-based architectures for protein recognition* - Department of Chemistry University of Sheffield, Sheffield, UK (29 Apr. 2016).
- (11) *Computational design of peptide-based architectures for protein recognition* - Department of Chemical and Process Engineering, University of Strathclyde, Glasgow, UK (2 Mar. 2016).
- (10) *Computational design of peptide-based nano-devices* - MoNaLiSA Fourth Midsummer Meeting, ELETTRA Synchrotron Light Laboratory, Trieste, Italy (5 Giu. 2015).
- (9) *Coupled binders for the development of novel nanodevices for protein recognition* - MoNaLiSA Third Midsummer Meeting, Department of Medical and Biological Sciences, University of Udine, Italy (11 Lug. 2014).
- (8) *Estimating peptides-protein binding affinities for the development of new peptide-based nanodevices for protein recognition* - MoNaLiSA Second Midsummer Meeting, Department of Medical and Biological Sciences, University of Udine, Italy (26 Lug. 2013).
- (7) *Auto-assemblamento molecolare tra laboratorio e calcolatore* (Molecular self-assembly through laboratory and computer), Department of Medical and Biological Sciences, University of Udine, Italy (7 Mar. 2013).
- (6) *Modelling techniques for the study of self-organised surface adsorbed molecular monolayers* - Department of Information Sciences, Ochanomizu University, Tokyo, Japan (24 Lug. 2012).
- (5) *Agent Based Modelling for the study of Molecular Self-Organisation* - Physics Department, University of Modena, Italy (19 Mag. 2011).
- (4) *Agent Based Modelling for the study of Molecular Self-Organisation* - ELETTRA Synchrotron Light Laboratory, Trieste, Italy (7 Apr. 2010).
- (3) *Agent Based Modelling for the study of Molecular Self-Organisation* - Complexity Forum, Complexity Science Doctoral Training Centre, University of Warwick, UK (17 Feb. 2010).
- (2) *An Agent-Based Model for Molecular Self-Organization* - CSC@Lunch Seminars, Centre for Scientific Computing, University of Warwick, UK (2 Feb. 2009).
- (1) *Il caos quantistico nelle reazioni chimiche triatomiche* (Quantum Chaos in Triatomic Chemical Reactions) - Chemistry Department, University of Perugia, Italy (30 Gen. 2007).

## Altri contributi a conferenze: Posters

---

- (13) *Computational design of customised nanobodies for biotechnological applications* - IOP Conference: The Physics of Soft and Biological Matter 2016, Cambridge, UK (6-8 Apr. 2016).
- (12) *Can computationally designed peptides be viable alternative to antibodies?* - Drug Discovery and Selection When Chemical Biology meets Drug Design, Nice, France (3-5 Lug. 2013).
- (11) *Can computationally designed peptides be viable alternative to antibodies?* - CLINAM 2013 Largest Nanomedicine Meeting in Europe European Summit for Clinical Nanomedicine and Targeted Medicine, Basel, CH (23-26 June 2013)
- (10) *Are peptides a viable alternative to antibodies?* - Drug Discovery Therapy World Congress 2013, 3-6 June 2013, Boston (USA)
- (9) *Structure and electronic properties of self-assembled transition metal phthalocyanines (M=Fe,Co,Ni,Cu,Zn) on the Au(110) surface* - SINFO - Workshop on Surfaces, INterfaces and Functionalization Processes in Organic Compounds and Applications (IMEM-CNR Institute, Parma, IT, 20-22 Giu. 2012)
- (8) *Computational methods for the study of surface adsorbed molecular monolayers* - 18th Interdisciplinary Surface Science Conference (University of Warwick, Coventry, UK, 4-7 Apr. 2011)
- (7) *Agent-based modelling for molecular self-organization* - 2010 workshop on Multiscale Molecular Modelling: Molecular Dynamics, Computational Statistical Mechanics, and Simulation Algorithms (Edinburgh, UK, 30 Giu. - 3 Lug. 2010)
- (6) *Agent-based modelling for molecular self-organization* - "EPSRC Symposium Workshop on Molecular Dynamics" (Warwick, UK, 01-05 Giu. 2009).
- (5) *Agent-based modelling for molecular self-organization* - Mini Symposium on Future Directions in Molecular Simulation (Warwick, UK, 02 Lug. 2009)
- (4) *Agent-based modelling for molecular self-organization* - Faraday Discussion 144: "Multiscale Modelling of Soft Matter" (Groningen, DE, 20-22 Lug. 2009)
- (3) *Agent-based modelling for molecular self-organization* - 42nd IUPAC Congress: "Chemistry Solutions" (Glasgow, UK, 02-07 Ago. 2009)
- (2) *Agent-based modelling for molecular self-organization* - EPSRC Network Mathematical Challenges of Molecular Dynamics, First Annual Conference (Warwick, UK, 14-16 Lug. 08)
- (1) *An agent-based approach for modeling self-organization* - Conference on Structure and Dynamics in Soft Matter and Biomolecules: From Single Molecules to Ensembles (ICTP, Trieste, IT, 04-08 Giu. 2007)