

**PROCEDURA DI VALUTAZIONE AI SENSI DELL'ART. 24, COMMA 5, DELLA LEGGE 240/2010, DI UN RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPO B) PRESSO IL DIPARTIMENTO DI BIOTECNOLOGIE MEDICHE E MEDICINA TRALAZIONALE DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO, SETTORE CONCORSUALE 03/A2 – MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE, SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM/02 – CHIMICA FISICA, AI FINI DELLA CHIAMATA QUALE PROFESSORE DI SECONDA FASCIA – CODICE PROCEDURA 900348.**

**ALLEGATO 1 AL VERBALE 2**

**SCHEMA DI RIPARTIZIONE PUNTEGGI**

(N.B. valutare analiticamente ogni titolo posseduto dal candidato)

**LUCA MOLLIKA**

<b>ATTIVITA' DIDATTICA (Punteggio massimo attribuibile 25)</b>	<b>punti</b>
Attività didattica frontale Chimica Generale e Inorganica (5 aa) Corsi elettivi (5 corsi + 1 modulo)	21
Attività didattica dottorato/scuole	1
Relatore/tutor (correlatore/tutor) di tesi di laurea triennale, magistrale e di dottorato Relatore di 5 tesi di laurea magistrale e correlatore di 3 Relatore di 5 tesi di laurea triennale Tutor di tirocinio di 2 studenti di master Co-supervisore di una tesi di dottorato	3.25
<b>PUNTEGGIO COMPLESSIVO</b>	<b>25</b>

<b>PUBBLICAZIONI (punteggio massimo attribuibile 52,5)</b>	<b>Tipologia</b>	<b>Punti</b>
1. Luca Mollica* and Gabriele Giachin, Recognition Mechanisms between a Nanobody and Disordered Epitopes of the Human Prion Protein: An Integrative Molecular Dynamics Study, <i>J. Chem. Inf. Model.</i> , 63, 2, 531–545, <b>2023</b> .	articolo	4.375
2. Francesca Munari, Luca Mollica, Carlo Valente, Francesca Parolini, Elham Ataie Kachoe, Giorgio Arrigoni, Mariapina D'Onofrio, Stefano Capaldi, Michael Assfalg, Structural Basis for ChaperoneIndependent Ubiquitination of Tau Protein by Its E3 Ligase CHIP, <i>Angew. Chem. Int. Ed. Engl.</i> , 61, e202112374, <b>2022</b> .	articolo	3.1875
3. Valeria Rondelli and Luca Mollica, Alexandros Koutsoubas, Nail Nasir, Marcus Trapp, Estelle Deboever, Paola Brocca, Magali Deleu, Carbohydrate-carbohydrate interaction drives the preferential insertion of dirhamnolipid into glycosphingolipid enriched membranes, <i>J. Colloid Interface Sci.</i> , 616, 739-748, <b>2022</b> .	articolo	3.875
4. Raffaele Iannuzzi, Grazisa Rossetti, Andrea Spitaleri, Raoul J. P. Bonnal, Massimiliano Pagani, Luca Mollica*, A Simplified	articolo	3.675

Amino Acidic Alphabet to Unveil the T-Cells Receptors Antigens: A Computational Perspective, <i>Frontiers in Chemistry</i> , 9, <b>2021</b> .		
5. M. Bernetti, E. Rosini, L. Mollica*, M. Masetti, L. Pollegioni, M. Recanatini, A. Cavalli, Binding residence time through scaled molecular dynamics: a prospective application to hDAAO inhibitors, <i>J. Chem. Inf. Model.</i> , 58, 2255–2265, <b>2018</b> .	articolo	3.875
6. M. Bernetti, M. Masetti, F. Pietrucci, M. Blackledge, M. Ringkjøbing Jensen, M. Recanatini, L. Mollica*, A. Cavalli, Structural and kinetic characterization of the intrinsically disordered protein SeV NTAIl through enhanced sampling simulations, <i>J. Phys. Chem. B</i> , 121, 9572–9582, <b>2017</b> .	articolo	3.475
7. L. Mollica, I. Theret, M. Antoine, F. Perron-Sierra, Y. Charton J. M. Fourquez, M. Wierzbicki, J. A. Boutin, G. Ferry, S. Decherchi, G. Bottegoni, P. Ducrot, A. Cavalli, Molecular Dynamics Simulations and Kinetic Measurements to Estimate and Predict Protein–Ligand Residence Times, <i>J. Med. Chem.</i> , 59, 7167–7176, <b>2016</b> .	articolo	4.375
8. L. Mollica*, G. Conti, L. Pollegioni, A. Cavalli, E. Rosini, Unveiling the Atomic-Level Determinants of Acylase-Ligand Complexes: An Experimental and Computational Study, <i>J. Chem. Inf. Model.</i> , 55, 2227–41, <b>2015</b> .	articolo	3.875
9. L. Mollica, S. Decherchi, S. R. Zia, R. Gaspari, A. Cavalli, W. Rocchia, Kinetics of protein-ligand unbinding via smoothed potential molecular dynamics simulations, <i>Sci. Rep.</i> , 5, 11539, <b>2015</b> .	articolo	4.375
10. P. Guerry, L. Salmon, L. Mollica, J. L. Ortega Roldan, P. Markwick, N. A. J. van Nuland, J. A. McCammon, M. Blackledge, Mapping the Population of Protein Conformational Energy Substates from NMR Dipolar Couplings, <i>Angew. Chem. Int. Ed. Engl.</i> , 52, 3181–3185, <b>2013</b> .	articolo	2.6875
11. L. Mollica, M. Baías, J. R. Lewandowski, B. J. Wylie, L. J. Sperling, C. M. Rienstra, L. Emsley, M. Blackledge, Atomic-Resolution Structural Dynamics in Crystalline Proteins from NMR and Molecular Simulation, <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> , 3(23), 3657–3662, <b>2012</b> .	articolo	3.875
12. L. Mollica, G. Morra, G. Colombo, G. Musco, HMGB1-carbenoxolone interactions: dynamics insights from combined nuclear magnetic resonance and molecular dynamics, <i>Chem. Asian J.</i> , 6(5), 1171–80, <b>2011</b> .	articolo	3.675
<b>PUNTEGGIO COMPLESSIVO</b>		<b>45.33</b>

<b>ATTIVITA' DI RICERCA (Punteggio massimo attribuibile 17,5)</b>	<b>punti</b>
Responsabile di progetti competitivi: PI di Progetto PRIN 2021 2 Partecipazioni a progetti nazionali	4

Brevetti	0
Relatore a congressi interazionali e nazionali: 3 presentazioni orali su invito a congressi internazionali 6 poster 1 organizzazione 4 seminari ad invito	4.7
Premi e riconoscimenti: Marie Curie Fellowship Altre 2 Fellowships	3
<b>PUNTEGGIO COMPLESSIVO</b>	<b>11.7</b>

<b>ATTIVITA GESTIONALE, ORGANIZZATIVA E DI SERVIZIO (punteggio massimo attribuibile 5)</b>	<b>Punti</b>
Membro Organi di Governo	0
Membro Collegio di Dottorato	0
Membro commissioni di Dipartimento e di Facoltà: 3 comitati, 2 commissioni, rappresentante dipartimentale	2.2
Attività editoriale e di revisione	2
<b>PUNTEGGIO COMPLESSIVO</b>	<b>4.2</b>

<b>PUNTEGGIO TOTALE</b>	<b>86.23 PUNTI</b>
-------------------------	--------------------