

CURRICULUM VITAE

DATI ANAGRAFICI

NOME E COGNOME Domenico Alberga
DATA DI NASCITA 23/11/1988
LUOGO DI NASCITA Modugno (BA)
CITTADINANZA Italiana
INDIRIZZO Via Spadavecchia 1,
70027 Palo del Colle (BA), Italia
RECAPITO TELEFONICO Cell: +393383384070
EMAIL alberdom88@gmail.com
PEC alberdom88@pec.it



ISTRUZIONE E FORMAZIONE

Dal 01/01/2013 al 31/12/2015

Dottorato di Ricerca in Fisica (conseguito il 06/04/2016)

Università: Università degli Studi di Bari "Aldo Moro"

Titolo della tesi: "Tecniche di simulazione molecolare applicate allo studio di sistemi polimerici e biologici"

Tutor: Prof. Gianluca Lattanzi

Dal 07/10/2013 al 11/10/2013

CECAM School "Simulating Soft Matter with ESPResSo"

Università: Institute for Computational Physics, Università di Stoccarda, Germania

Dal 16/07/2013 al 19/07/2013

CECAM School "Atomistic and molecular simulations on massively parallel architectures"

Università: Chimie ParisTech, Parigi, Francia

23/11/2012

Laurea Magistrale in Fisica

Università: Università degli Studi di Bari "Aldo Moro"

Titolo della tesi: "Modelli molecolari per i semiconduttori polimerici P3HT and PBTTT"

Valutazione: 110/110 e lode

Dal 09/07/2012 al 27/07/2012

CECAM School "Summer school on Atomistic Simulation Techniques"

Università: SISSA, Trieste

22/07/2010

Laurea Triennale in Fisica

Università: Università degli Studi di Bari "Aldo Moro"

Titolo della tesi: "Ricostruzione di mesoni charmati strani nell'esperimento BaBar a SLAC"

Valutazione: 110/110

04/07/2007

Diploma di maturità scientifica

Istituto: Liceo Scientifico E. Amaldi di Bitetto (BA)

Valutazione: 100/100

ESPERIENZE PROFESSIONALI IN ITALIA E ALL'ESTERO

Dal 15/06/2023 in corso

Tecnologo

CNR – Istituto di Cristallografia (Bari)

Dal 25/05/2020 al 31/01/2023

Software developer

Exprivia S. p. A., Molfetta (BA)

Sviluppo backend del Pannello Unico Cartografico (PUC), una web application utilizzata da Enel per gestire la rete elettrica nazionale, inclusa la clientela. Il PUC consente la georeferenziazione di ogni elemento della rete elettrica sfruttando le tecnologie Postgis e Geoserver. In particolare l'attività si focalizza sullo sviluppo backend dell'editing della rete elettrica. Tecnologie utilizzate: Java, Hibernate, Spring, Weblogic, Postgres, Geoserver, GIS, WS REST, Java Microservices, Business Services WSO2

Dal 11/03/2020 al 11/04/2020

Contratto di lavoro autonomo di natura occasionale

Università: Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco, Università degli Studi di Bari "Aldo Moro". **Responsabile Scientifico:** Prof. Orazio Nicolotti

Descrizione Attività: Sviluppo di una piattaforma virtuale per il de novo design di molecole bioattive mediante tecniche di intelligenza artificiale.

Ho adattato un algoritmo di de novo design basato su **Recurrent Neural Networks** e **Reinforcement Learning** per la generazione di nuove molecole con caratteristiche chimico-fisiche definite dall'utente. Ho implementato l'algoritmo in un'interfaccia grafica **pyqt5** (<https://github.com/alberdom88/moo-denovo>). Tutto il lavoro è stato svolto in **python**.

Dal 16/07/2018 al 31/10/2019

CINECA - SuperComputing Applications and Innovation Department – SCAI, Casalecchio di Reno (BO). **Attività di HPC-cluster management:** gestione di un cluster di calcolo ad alte prestazioni basato su **ambiente Linux** e **scheduler SLURM** (creazione utenze e progetti, accounting e assegnazione ore calcolo, sanity check LINPACK e STREAM per monitorare lo stato dei nodi di calcolo)

Attività di help-desk e user support: rispondere a tickets aperti dagli utenti del cluster di calcolo su problematiche di varia natura tra cui compilazione ed installazione codici, assistenza nella sottomissione dei job sul cluster di calcolo, problematiche relative allo scheduler SLURM.

Dal 16/03/2017 al 15/07/2018

Assegnista di ricerca (post-doc) presso l'Università degli Studi di Bari – Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco – Bari (Italia) **Responsabile Scientifico:** Prof. Orazio Nicolotti

Descrizione attività: Sviluppo di modelli computazionali **machine learning (k-nn, SVM, random forest, neural networks)** per la predizione dell'attività biologica e tossicologica di sostanze chimiche. Simulazioni di Dinamica Molecolare e DFT.

Ho sviluppato un modello di classificazione **machine learning** per la predizione dello spettro di attività di small molecules basato su un algoritmo **k-nn**. Ho implementato l'algoritmo in una **piattaforma web** in cui un utente può sottoporre una molecola query e visualizzare in output il risultato della predizione. Tutto il lavoro è stato svolto in **python**.

Dal 01/03/2016 al 28/02/2017

Assegnista di ricerca (post-doc) presso l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris – Parigi (Francia) **Responsabile Scientifico: Prof. Carlo Adamo**

Descrizione attività: Studio computazionale delle proprietà di trasporto di carica in materiali donori usati in celle fotovoltaiche organiche in stato amorfo e cristallino. Ho realizzato un codice in **fortran** per il calcolo di alcune quantità.

INDICATORI BIBLIOMETRICI

Numero totale di pubblicazioni = 42 (11 come PRIMO AUTORE; 1 come AUTORE DI RIFERIMENTO)

h-index = 20; numero di citazioni totali = 940. Fonte: Scopus - Elsevier, ultimo accesso eseguito il 08/02/2023 (<https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56136631500>)

h-index = 22; numero di citazioni totali = 1178. Fonte: Google Scholar, ultimo accesso eseguito il 08/02/2023

(https://scholar.google.it/citations?hl=it&user=uDIR6AQAAAAJ&view_op=list_works&sortby=pubdate)

LISTA DI N.39 PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE PEER-REVIEWED

1. B.D. Belviso, G.F. Mangiatordi, **D. Alberga**, V. Mangini, B. Carrozzini, R. Caliandro, Structural Characterization of the Full-Length Anti-CD20 Antibody Rituximab, *Frontiers in Molecular Biosciences*. 9 (2022).
2. F. Ciriaco, N. Gambacorta, **D. Alberga**, O. Nicolotti, Quantitative polypharmacology profiling based on a multifingerprint similarity predictive approach, *Journal of Chemical Information and Modeling*. 61 (2021) 4868–4876.
3. K. Mansouri, A.L. Karmaus, J. Fitzpatrick, G. Patlewicz, P. Pradeep, **D. Alberga**, N. Alepee, T.E. Allen, D. Allen, V.M. Alves, others, CATMoS: collaborative acute toxicity modeling suite, *Environmental Health Perspectives*. 129 (2021) 047013.
4. P. Delre, **D. Alberga**, A. Gijsbers, N. Sánchez-Puig, O. Nicolotti, M. Saviano, D. Siliqi, G.F. Mangiatordi, Exploring the role of elongation Factor-Like 1 (EFL1) in Shwachman-Diamond syndrome through molecular dynamics, *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*. 38 (2020) 5219–5229.
5. **D. Alberga**, N. Gambacorta, D. Trisciuzzi, F. Ciriaco, N. Amoroso, O. Nicolotti, De novo drug design of targeted chemical libraries based on artificial intelligence

and pair-based multiobjective optimization, *Journal of Chemical Information and Modeling*. 60 (2020) 4582–4593.

6. M. Turelli, **D. Alberga**, G. Lattanzi, I. Ciofini, C. Adamo, Theoretical insights on acceptor–donor dyads for organic photovoltaics, *Physical Chemistry Chemical Physics*. 22 (2020) 27413–27424.
7. K. Mansouri, N. Kleinstreuer, A.M. Abdelaziz, **D. Alberga**, V.M. Alves, P.L. Andersson, C.H. Andrade, F. Bai, I. Balabin, D. Ballabio, others, CoMPARA: collaborative modeling project for androgen receptor activity, *Environmental Health Perspectives*. 128 (2020) 027002.
8. D. Blasi, L. Sarcina, A. Tricase, A. Stefanachi, F. Leonetti, **D. Alberga**, G.F. Mangiatordi, K. Manoli, G. Scamarcio, R.A. Picca, others, Enhancing the sensitivity of biotinylated surfaces by tailoring the design of the mixed self-assembled monolayer synthesis, *ACS Omega*. 5 (2020) 16762–16771.
9. **D. Alberga**, D. Trisciuzzi, K. Mansouri, G.F. Mangiatordi, O. Nicolotti, Prediction of acute oral systemic toxicity using a multifingerprint similarity approach, *Toxicological Sciences*. 167 (2019) 484–495.
10. M. Montaruli, **D. Alberga**, F. Ciriaco, D. Trisciuzzi, A.R. Tondo, G.F. Mangiatordi, O. Nicolotti, Accelerating drug discovery by early protein drug target prediction based on a multi-fingerprint similarity search, *Molecules*. 24 (2019) 2233.
11. **D. Alberga**, D. Trisciuzzi, M. Montaruli, F. Leonetti, G.F. Mangiatordi, O. Nicolotti, A new approach for drug target and bioactivity prediction: the multifingerprint similarity search algorithm (MuSSeL), *Journal of Chemical Information and Modeling*. 59 (2018) 586–596.
12. A. Botta, C. Costabile, V. Venditto, S. Pragliola, R. Liguori, A. Rubino, **D. Alberga**, M. Savarese, C. Adamo, Optoelectronic properties of poly (N-alkenyl-carbazole) s driven by polymer stereoregularity, *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry*. 56 (2018) 242–251.
13. E.M. Gargano, G.F. Mangiatordi, I. Weber, C. Goebel, **D. Alberga**, O. Nicolotti, W. Ruess, S. Wierlacher, Persulfate Reaction in a Hair-Bleaching Formula: Unveiling the Unconventional Reactivity of 1, 13-Diamino-4, 7, 10-Trioxatridecane, *ChemistryOpen*. (2018).
14. E. Macchia, K. Manoli, B. Holzer, C. Di Franco, M. Ghittorelli, F. Torricelli, **D. Alberga**, G.F. Mangiatordi, G. Palazzo, G. Scamarcio, others, Single-molecule detection with a millimetre-sized transistor, *Nature Communications*. 9 (2018) 1–10.
15. G.F. Mangiatordi, T. Guzzo, E.C. Rossano, D. Trisciuzzi, **D. Alberga**, G. Fasciglione, M. Coletta, A. Topai, O. Nicolotti, Design, Synthesis, and Biological Evaluation of Tetrahydro- β -carboline Derivatives as Selective Sub-Nanomolar Gelatinase Inhibitors, *ChemMedChem*. 13 (2018) 1343–1352.
16. L. Wilbraham, M. Louis, **D. Alberga**, A. Brosseau, R. Guillot, F. Ito, F. Labat, R. Métivier, C. Allain, I. Ciofini, Revealing the origins of mechanically induced fluorescence changes in organic molecular crystals, *Advanced Materials*. 30 (2018) 1800817.
17. **D. Alberga**, I. Ciofini, G.F. Mangiatordi, A. Pedone, G. Lattanzi, J. Roncali, C. Adamo, Effects of substituents on transport properties of molecular materials for organic solar cells: a theoretical investigation, *Chemistry of Materials*. 29 (2017) 673–681.
18. **D. Alberga**, D. Trisciuzzi, G. Lattanzi, J.L. Bennett, A.S. Verkman, G.F. Mangiatordi, O. Nicolotti, Comparative molecular dynamics study of neuromyelitis

- optica-immunoglobulin G binding to aquaporin-4 extracellular domains, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Biomembranes*. 1859 (2017) 1326–1334.
19. Y. Jiang, C. Cabanetos, S. Jungstittiwong, **D. Alberga**, C. Adamo, J. Roncali, Effects of Anthryl Groups on the Charge Transport and Photovoltaic Properties of Small Triarylamine-Based Donor-Acceptor Molecules: A Joint Experimental and Theoretical Study, *ChemistrySelect*. 2 (2017) 6296–6303.
 20. G.F. Mangiatordi, **D. Alberga**, L. Pisani, D. Gadaleta, D. Trisciuzzi, R. Farina, A. Carotti, G. Lattanzi, M. Catto, O. Nicolotti, A rational approach to elucidate human monoamine oxidase molecular selectivity, *European Journal of Pharmaceutical Sciences*. 101 (2017) 90–99.
 21. G.F. Mangiatordi, D. Trisciuzzi, **D. Alberga**, N. Denora, R.M. Iacobazzi, D. Gadaleta, M. Catto, O. Nicolotti, Novel chemotypes targeting tubulin at the colchicine binding site and unbiasing P-glycoprotein, *European Journal of Medicinal Chemistry*. 139 (2017) 792–803.
 22. D. Trisciuzzi, **D. Alberga**, K. Mansouri, R. Judson, E. Novellino, G.F. Mangiatordi, O. Nicolotti, Predictive structure-based toxicology approaches to assess the androgenic potential of chemicals, *Journal of Chemical Information and Modeling*. 57 (2017) 2874–2884.
 23. **D. Alberga**, G.F. Mangiatordi, Understanding complexity of physiology by combined molecular simulations and experiments: anion channels as a proof of concept, *The Journal of Physiology*. 594 (2016) 2777.
 24. Z. Ghaemi, **D. Alberga**, P. Carloni, A. Laio, G. Lattanzi, Permeability coefficients of lipophilic compounds estimated by computer simulations, *Journal of Chemical Theory and Computation*. 12 (2016) 4093–4099.
 25. P. Imbrici, C. Altamura, G.M. Camerino, G.F. Mangiatordi, E. Conte, L. Maggi, R. Brugnoni, K. Musaraj, R. Caloiero, **D. Alberga**, others, Multidisciplinary study of a new CIC-1 mutation causing myotonia congenita: a paradigm to understand and treat ion channelopathies, *The FASEB Journal*. 30 (2016) 3285–3295.
 26. E. Macchia, **D. Alberga**, K. Manoli, G.F. Mangiatordi, M. Magliulo, G. Palazzo, F. Giordano, G. Lattanzi, L. Torsi, Organic bioelectronics probing conformational changes in surface confined proteins, *Scientific Reports*. 6 (2016) 1–12.
 27. G.F. Mangiatordi, **D. Alberga**, C.D. Altomare, A. Carotti, M. Catto, S. Cellamare, D. Gadaleta, G. Lattanzi, F. Leonetti, L. Pisani, others, Mind the gap! A journey towards computational toxicology, *Molecular Informatics*. 35 (2016) 294–308.
 28. G.F. Mangiatordi, **D. Alberga**, D. Trisciuzzi, G. Lattanzi, O. Nicolotti, Human aquaporin-4 and molecular modeling: historical perspective and view to the future, *International Journal of Molecular Sciences*. 17 (2016) 1119.
 29. A. Stefanachi, G.F. Mangiatordi, P. Tardia, **D. Alberga**, F. Leonetti, M. Niso, N.A. Colabufo, C. Adamo, O. Nicolotti, S. Cellamare, Design, synthesis, biological evaluation, NMR and DFT studies of structurally simplified trimethoxy benzamides as selective P-glycoprotein inhibitors: the role of molecular flatness, *Chemical Biology & Drug Design*. 88 (2016) 820–831.
 30. **D. Alberga**, G.F. Mangiatordi, F. Labat, I. Ciofini, O. Nicolotti, G. Lattanzi, C. Adamo, Theoretical investigation of hole transporter materials for energy devices, *The Journal of Physical Chemistry C*. 119 (2015) 23890–23898.
 31. **D. Alberga**, G.F. Mangiatordi, A. Motta, O. Nicolotti, G. Lattanzi, Effects of different self-assembled monolayers on thin-film morphology: a combined DFT/MD simulation protocol, *Langmuir*. 31 (2015) 10693–10701.

32. **D. Alberga**, A. Perrier, I. Ciofini, G.F. Mangiatordi, G. Lattanzi, C. Adamo, Morphological and charge transport properties of amorphous and crystalline P3HT and PBTTT: insights from theory, *Physical Chemistry Chemical Physics*. 17 (2015) 18742–18750.
33. G.F. Mangiatordi, **D. Alberga**, L. Siragusa, L. Goracci, G. Lattanzi, O. Nicolotti, Challenging AQP4 druggability for NMO-IgG antibody binding using molecular dynamics and molecular interaction fields, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Biomembranes*. 1848 (2015) 1462–1471.
34. D. Trisciuzzi, **D. Alberga**, K. Mansouri, R. Judson, S. Cellamare, M. Catto, A. Carotti, E. Benfenati, E. Novellino, G.F. Mangiatordi, others, Docking-based classification models for exploratory toxicology studies on high-quality estrogenic experimental data, *Future Medicinal Chemistry*. 7 (2015) 1921–1936.
35. P. Imbrici, L. Maggi, G. Mangiatordi, M. Dinardo, C. Altamura, R. Brugnoli, **D. Alberga**, G.L. Pinter, G. Ricci, G. Siciliano, others, CIC-1 mutations in myotonia congenita patients: insights into molecular gating mechanisms and genotype–phenotype correlation, *The Journal of Physiology*. 593 (2015) 4181–4199.
36. **D. Alberga**, G.F. Mangiatordi, L. Torsi, G. Lattanzi, Effects of annealing and residual solvents on amorphous P3HT and PBTTT Films, *The Journal of Physical Chemistry C*. 118 (2014) 8641–8655.
37. **D. Alberga**, O. Nicolotti, G. Lattanzi, G.P. Nicchia, A. Frigeri, F. Pisani, V. Benfenati, G.F. Mangiatordi, A new gating site in human aquaporin-4: Insights from molecular dynamics simulations, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Biomembranes*. 1838 (2014) 3052–3060.
38. F. Pisani, M.G. Mola, L. Simone, S. Rosito, **D. Alberga**, G.F. Mangiatordi, G. Lattanzi, O. Nicolotti, A. Frigeri, M. Svelto, others, Identification of a point mutation impairing the binding between aquaporin-4 and neuromyelitis optica autoantibodies, *Journal of Biological Chemistry*. 289 (2014) 30578–30589.
39. P. Tardia, A. Stefanachi, M. Niso, D.A. Stolfi, G.F. Mangiatordi, **D. Alberga**, O. Nicolotti, G. Lattanzi, A. Carotti, F. Leonetti, others, Trimethoxybenzanilide-based P-glycoprotein modulators: an interesting case of lipophilicity tuning by intramolecular hydrogen bonding, *Journal of Medicinal Chemistry*. 57 (2014) 6403–6418.

LISTA DI N.3 CAPITOLI DI LIBRO

1. G.I. Passeri, D. Trisciuzzi, **D. Alberga**, L. Siragusa, F. Leonetti, G.F. Mangiatordi, O. Nicolotti, Strategies of virtual screening in medicinal chemistry, in: *Data Analytics in Medicine: Concepts, Methodologies, Tools, and Applications*, IGI Global, 2020: pp. 194–225.
2. M. Catto, D. Trisciuzzi, **D. Alberga**, G.F. Mangiatordi, O. Nicolotti, Multitarget drug design for neurodegenerative diseases, in: *Multi-Target Drug Design Using Chem-Bioinformatic Approaches*, Humana Press, New York, NY, 2018: pp. 93–105.
3. D. Trisciuzzi, **D. Alberga**, F. Leonetti, E. Novellino, O. Nicolotti, G.F. Mangiatordi, Molecular docking for predictive toxicology, in: *Computational Toxicology*, Humana Press, New York, NY, 2018: pp. 181–197.

PROCEEDINGS RELATIVI A CONGRESSI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

- **D Alberga** "Modeling organic thin film transistors: a journey from electronic to biological applications" FisMat 2015 Italian National Conference on Condensed Matter Physics (Including Optics, Photonics, Liquids, Soft Matter) Book of Abstract, #435, 216-217. ISBN: 978-88-907460-8-6

PARTECIPAZIONE COME RELATORE A CONVEGNI DI CARATTERE SCIENTIFICO IN ITALIA O ALL'ESTERO

- **D Alberga** "Hole transporter materials for organic photovoltaics: a theoretical approach" TRMME workshop 2016, 13.06.2016-17.06.2016, San Sebastian (Spagna).
- **D Alberga** "Modeling organic thin film transistors: a journey from electronic to biological applications" FisMat 2015 Italian National Conference on Condensed Matter Physics (Including Optics, Photonics, Liquids, Soft Matter) Book of Abstract, 28.09.2015-02.10.2015, Palermo (Italia).

DIREZIONE O PARTECIPAZIONE ALLE ATTIVITÀ DI UN GRUPPO DI RICERCA CARATTERIZZATO DA COLLABORAZIONI A LIVELLO NAZIONALE O INTERNAZIONALE

- **Partecipazione alle attività di ricerca del gruppo della Prof.ssa Luisa Torsi, Università degli Studi di Bari "A. Moro", Dipartimento di Chimica.** L'attività di ricerca è principalmente dedicata agli studi computazionali, tramite tecniche di Dinamica Molecolare, di biosensori elettronici capaci di rilevare l'interazione proteina-ligando e proteina-anticorpo fino al limite della singola molecola. La simulazione dei biosensori permette di comprenderne i meccanismi di funzionamento a livello molecolare aprendo la strada verso la loro ingegnerizzazione e commercializzazione. **Risultati conseguiti: pubblicazioni n. 8, n. 14, n. 26.**
- **Partecipazione, in qualità di dottorando e assegnista di ricerca, alle attività di ricerca del gruppo del Prof. Orazio Nicolotti, Università degli Studi di Bari "A. Moro", Dipartimento di Farmacia – Scienze del Farmaco.** L'attività scientifica è stata principalmente dedicata alle seguenti tematiche di ricerca: a) Studio delle relazioni struttura attività e progettazione molecolare, attraverso tecniche di Molecular Docking, Dinamica Molecolare e Density Functional Theory, di inibitori selettivi di proteine d'interesse terapeutico ed in particolare: Tubulina, MAO, PgP, CIC-1, MMPs **Risultati conseguiti: pubblicazioni n.15, n. 20, n. 21, n. 23, n. 25, n. 29, n. 35, n. 39** b) Sviluppo di nuovi metodi computazionali per la progettazione razionale di nuovi farmaci tramite tecniche di artificial intelligence **Risultati conseguiti: pubblicazione n. 5;** c) Studio delle proprietà di trasporto e della druggability dell'aquaporina-4, canale proteico di membrana coinvolto nell'eziopatogenesi della Neuromielite Ottica e di alcune forme di sordità. **Risultati conseguiti: pubblicazioni n. 18, n. 28, n. 33, n. 37, n. 38** d) Progettazione di modelli di tossicologia docking-based per la predizione di attività di interferenza endocrina (androgenica o estrogenica) di molecole. **Risultati conseguiti: pubblicazioni n. 22, n. 34.** e) Realizzazione di modelli di tossicologia chemioinformatici per la predizione in-silico della tossicità acuta di sostanze. **Risultati conseguiti: pubblicazione n. 9.** e) Realizzazione di modelli chemioinformatici per la predizione in-silico dei probabili target farmacologici a della

bioattività di small molecules. **Risultati conseguiti: pubblicazione n. 2, n. 10, n. 11**

- **Partecipazione, in qualità di dottorando e assegnista di ricerca, alle attività di ricerca del gruppo del Prof. Carlo Adamo, Chimie ParisTech, ENSCP di Parigi e del Prof. Gianluca Lattanzi, Università degli Studi di Trento, Dipartimento di Fisica.** L'attività di ricerca è stata principalmente dedicata allo studio delle proprietà di trasporto di carica di polimeri e molecole organiche in fase amorfa e cristallina. Lo studio computazionale, condotto con le tecniche della Dinamica Molecolare e Density Functional Theory, ha permesso di studiare la mobilità dei portatori di carica in materiali innovativi e porta alla realizzazione di transistor organici e celle solari organiche sempre più efficienti. **Risultati conseguiti: pubblicazioni n. 6, n. 17, n. 19, n. 30, n. 31, n. 32, n. 36**
- **Partecipazione al progetto CERAPP (Collaborative Estrogen Receptor Activity Prediction Project)** della Environmental Protection Agency (EPA) degli Stati Uniti d'America per il programma EDSP (Endocrine Disruptor Screening Program EDSP). **Coordinatore:** Richard Judson del National Center for Computational Toxicology della US EPA. **Risultati conseguiti: pubblicazione n. 22**
- **Partecipazione al progetto COMPARA (Collaborative Modelling Project for Androgen Receptor Activity)** della Environmental Protection Agency (EPA) degli Stati Uniti d'America per il programma EDSP (Endocrine Disruptor Screening Program EDSP). **Coordinatore:** Richard Judson del National Center for Computational Toxicology della US EPA. **Risultati conseguiti: pubblicazioni n. 7**
- **Partecipazione all' Acute Toxicity Workgroup (ATWG) dell' Interagency Coordinating Committee on the Validation of Alternative Methods (ICCVAM).** **Risultati conseguiti: pubblicazione n. 9**
- **Partecipazione alle attività di ricerca del gruppo della Prof.ssa Ilaria Ciofini, Chimie ParisTech, ENSCP di Parigi.** L'attività è stata dedicata allo studio computazionale (Dinamica Molecolare, Density Functional Theory) di materiali meccanocromici innovativi. **Risultati conseguiti: pubblicazione n. 16.**
- **Partecipazione alle attività di ricerca del gruppo del Prof. Alessandro Laio, SISSA, Trieste.** L'attività è stata dedicata alla realizzazione di un modello di trasporto passivo dei farmaci attraverso le membrane cellulari. **Risultati conseguiti: pubblicazione n. 24.**

COMPETENZE PERSONALI

Lingue madre: Italiano

Altre lingue:	Comprensione		Ascolto		Produzione scritta
	Ascolto	Lettura	Interazione	Produzione orale	
Inglese	Ottimo	Ottimo	Ottimo	Ottimo	Ottimo

Competenze tecniche

- Simulazioni di Dinamica Molecolare di sistemi complessi: proteine, polimeri, molecole organiche e materiali in fase cristallina e di bulk.

- Metodi di Density Functional Theory.
- Analisi ed elaborazione di dati chemioinformatici multidimensionali.
- Algoritmi di machine learning e deep learning.
- Gestione Cluster di calcolo HPC

Abilità informatiche

- Conoscenza dei linguaggi di programmazione Fortran, C/C++, Python (in particolare pacchetti numpy, pandas, scikit-learn, keras, rdkit, matplotlib ed altri)
- Esperienza nell'utilizzo dei software di simulazione molecolare: NAMD, GROMACS, Gaussian 09, Schrödinger Suite;
- Esperienza nell'utilizzo dei software di visualizzazione: VMD e Pymol.
- Conoscenza dell'ambiente utente e dell'ambiente di sviluppo Linux.
- Java, Hibernate, Spring, Weblogic, Postgres, Geoserver, GIS, WS REST, Java Microservices, Business Services WSO2

Certificazioni

- MongoDB Certified Developer, Associate Level, LICENSE #328-379-239

Autorizzo il trattamento dei miei dati personali ai sensi del Decreto Legislativo 30 giugno 2003, n. 196 "Codice in materia di protezione dei dati personali", anche con modalità elettroniche e/o automatizzate, per le finalità di ricerca e selezione del personale.

Luogo e data

Bari, 08/02/2023

Il Dichiarante

