



ALLA MAGNIFICA RETTRICE  
DELL'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MILANO

COD. ID: 7097

Il sottoscritto chiede di essere ammesso a partecipare alla selezione pubblica, per titoli ed esami, per il conferimento di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Bioscienze

Responsabile scientifico: Prof. Ricagno Stefano

## CURRICULUM VITAE

### INFORMAZIONI PERSONALI

<b>Cognome</b>	Nawaz
<b>Nome</b>	Afzal Ali

### OCCUPAZIONE ATTUALE

<b>Incarico</b>	<b>Struttura</b>

### ISTRUZIONE E FORMAZIONE

<b>Titolo</b>	<b>Corso di studi</b>	<b>Università</b>	<b>anno conseguimento titolo</b>
Laurea Magistrale o equivalente	Pharmaceutical biotechnology	Università degli Studi di Milano	2024
Specializzazione			
Dottorato Di Ricerca			
Master			
Diploma Di Specializzazione Medica			
Diploma Di Specializzazione Europea			
Altro			

### ISCRIZIONE AD ORDINI PROFESSIONALI

<b>Data iscrizione</b>	<b>Ordine</b>	<b>Città</b>



## LINGUE STRANIERE CONOSCIUTE

lingue	livello di conoscenza
English	B2

## PREMI, RICONOSCIMENTI E BORSE DI STUDIO

anno	Descrizione premio
2021	Borsa di Studio - DSU
2022	Borsa di Studio - DSU
2023	Borsa di Studio - DSU

## ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA

### **Research Assistant (Remote) - Relatore: Associate Professor Zubair Anwar**

#### **Project Title: Inclusion complex formation between different drugs and cyclodextrins**

As a Research Assistant, I have employed molecular docking simulations to predict drug-cyclodextrin interactions, successfully identifying 5-FU- $\gamma$ -CD as the candidate with the highest binding affinity among the investigated inclusion complexes. Additionally, I actively contribute to the preparation of research papers, reports, and presentations to effectively communicate findings.

### **Master's Thesis Internship - Relatore: Professor Ivano Eberini**

#### **Title: In Silico Analysis of the Outward-Open OCT2 ligand Recognition Mechanism**

My 12-month thesis internship focuses on modeling the structure of the SLC22A2/OCT2 protein to identify key residues for recognition and find ligands with highest binding affinity. Mainly, I used UniProt and BLAST for template search necessary for homology modelling, which led to another protein called OCT2. Although a template for OCT2 was found in the PDB database, it was based on mutated sequences and unsuitable for the research. Therefore, I used the wild type SLC22A2 sequence and the mutated OCT2 structure for homology modeling to obtain a reliable 3D structure for SLC22A2/OCT2. Using the OPM server, I oriented the model in the membrane and then performed MD simulations using Desmond. I observed the system stability and protein flexibility by calculating RMSD and RMSF values. After structure validation, docking calculations were performed to characterize the binding site of the protein using a library of 105 small molecules. Finger printing analysis was done to highlight interacting residues, and docking scores provided an approximation of ligand binding affinity.

## ATTIVITÀ PROGETTUALE

Anno	Progetto



## TITOLARITÀ DI BREVETTI

<b>Brevetto</b>

## CONGRESSI, CONVEGNI E SEMINARI

<b>Data</b>	<b>Titolo</b>	<b>Sede</b>

## PUBBLICAZIONI

<b>Libri</b>
-

<b>Articoli su riviste</b>
-

<b>Atti di convegni</b>
-



## ALTRE INFORMAZIONI

- Successfully developed a 3D structural model for the Organic Cation Transporter (OCT2)
- Skilled in homology modeling, molecular docking and molecular dynamics simulations and have knowledge of Cryo-EM
- Knowledge of FTIR, ThT Tests and Negative Staining
- Knowledge of protein biochemistry and biophysics
- Foundational knowledge of R and Python programming languages
- Experienced in navigating and extracting valuable information from biological databases

Le dichiarazioni rese nel presente curriculum sono da ritenersi rilasciate ai sensi degli artt. 46 e 47 del DPR n. 445/2000.

Il presente curriculum, non contiene dati sensibili e dati giudiziari di cui all'art. 4, comma 1, lettere d) ed e) del D.Lgs. 30.6.2003 n. 196.

**RICORDIAMO** che i curricula **SARANNO RESI PUBBLICI sul sito di Ateneo** e pertanto si prega di non inserire dati sensibili e personali. Il presente modello è già precostruito per soddisfare la necessità di pubblicazione senza dati sensibili.

Si prega pertanto di **NON FIRMARE** il presente modello.

Luogo e data: Milan Italy, 16-2-2025