



ALLA MAGNIFICA RETTRICE  
DELL'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MILANO

COD. ID: 7069

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 Biotecnologie Mediche e Medicina Traslazionale

Responsabile scientifico: Prof. Zanchetta Giuliano

## CURRICULUM VITAE

### INFORMAZIONI PERSONALI

Cognome	Nawaz
Nome	Afzal Ali

### OCCUPAZIONE ATTUALE

Incarico	Struttura

### ISTRUZIONE E FORMAZIONE

Titolo	Corso di studi	Università	anno conseguimento titolo
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

Data iscrizione	Ordine	Città



## LINGUE STRANIERE CONOSCIUTE

lingue	livello di conoscenza
English	B2

## PREMI, RICONOSCIMENTI E BORSE DI STUDIO

anno	Descrizione premio
2021-2023	Borsa di Studio - DSU

## ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA

### Research Assistant (Hybrid Mode) - Relatore: Associate Professor Zubair Anwar

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

For this project, I utilized molecular docking to predict how different drugs interact with the cyclodextrin cavity, identifying optimal binding sites and evaluating the strength and nature of interactions, including hydrophobic forces and hydrogen bonding. Additionally, I conducted molecular dynamics (MD) simulations to analyze the dynamic behavior, stability, and overall integrity of the drug-cyclodextrin complex under varying environmental conditions.

### 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

Data	Titolo	Sede

## PUBBLICAZIONI

<b>Libri</b>
-

<b>Articoli su riviste</b>
-

<b>Atti di convegni</b>
-



## ALTRE INFORMAZIONI

- Knowledge of human anatomy and physiology and the principles of optics
- Knowledge of virtual reality technologies

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, 20-1-2025