

# Luca Mollica

## CURRICULUM VITAE

### INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	MOLLIKA
NOME	LUCA
DATA DI NASCITA	10.10.1977

### ESPERIENZE LAVORATIVE E PROFESSIONALI

#### **10/2018 - presente**

Professore a contratto di Chimica Generale e Inorganica

Ente: Corso di laurea triennale in Biotecnologie Mediche, Università degli Studi di Milano, Italia

#### **04/2018 - presente**

Assegnista di ricerca (B)

Ente: Università degli Studi di Milano, Milano, Italia

Sede: Integrative Biology Unit, Istituto Nazionale Genetica Molecolare (INGM), Milano, Italia

Direttore scientifico: Prof. Massimiliano Pagani

#### **01/2014 - 01/2018**

Senior Postdoc

Ente: Istituto Italiano di Tecnologia (IIT)

Sede: Compunet, Istituto Italiano di Tecnologia, Genova, Italia

Direttore scientifico: Prof. Andrea Cavalli

#### **05/2015 - 01/2018**

Collaboratore scientifico / consulente

Ente: BiKi Technologies s.r.l.

Sede: Istituto Italiano di Tecnologia, Genova, Italia

Direttore scientifico responsabile: Prof. Andrea Cavalli

#### **03/2010 - 01/2014**

Postdoc (Ingenieur de Recherche/Chercheur)

Ente: Institut de Biologie Structurale (IBS)

Sede: Protein Dynamics and Flexibility by NMR Group, IBS, Grenoble, Francia

Direttore scientifico: Dr. Martin Blackledge

#### **11/2008 - 02/2010**

Postdoc

Ente: Fondazione Telethon / Dulbecco Telethon Institute (DTI)

Sede: Laboratorio di NMR biomolecolare, DIBIT/Ospedale San Raffaele, Milano, Italia

Direttrice scientifica: Dr. Giovanna Musco

#### **05/2003 - 11/2008**

Collaboratore scientifico a contratto

Ente: Fondazione Telethon / Dulbecco Telethon Institute (DTI)

Sede: Laboratorio di NMR biomolecolare, DIBIT/Ospedale San Raffaele, Milano, Italia  
Direttrice scientifica: Dr. Giovanna Musco

**09/2005 - 01/2006**

Collaboratore scientifico in visita  
Ente: International Business Machine (IBM)  
Sede: Zurich Research Laboratory, Rueschlikon, Svizzera  
Direttrice scientifica: Prof. Wanda Andreoni

**05/2005 - 11/2008**

Studiante di Dottorato di Ricerca in Biologia Cellulare e Molecolare  
Università "Vita Salute - S.Raffaele" / Open University International PhD Program  
Sede ospitante: DIBIT (Ospedale San Raffaele, Milano, Italia), Laboratorio di NMR Biomolecolare  
Direttore scientifico e supervisore: Dott.ssa Giovanna Musco  
Co-supervisori: Prof. Marco Bianchi, Prof. Mike Williamson

**07/2002 - 05/2003**

Collaboratore scientifico volontario (servizio civile)  
Ente: Istituto di ricerche Farmacologiche "Mario Negri" (IRFMN)  
Sede: Laboratorio di Biochimica e Chimica delle Proteine, IRFMN, Milano, Italia  
Direttore scientifico: Dr. Mario Salmona

**ESPERIENZE ED ATTIVITÀ DIDATTICHE**

**2019-2020**

Docente del corso elettivo "Data handling in biomedical sciences" per il corso di laurea magistrale in Medical Biotechnology and Molecular Medicine, Università degli Studi di Milano.

**2018-2019/2019-2020**

Docente ospite del corso "Chimica e Chimica computazionale" (Prof. Massimo Mella) per il corso di laurea magistrale in Chimica e Chimica Industriale, Università degli Studi dell'Insubria (sede di Como).

**2018-2019/2019-2020**

Professore a contratto di Chimica Generale e Inorganica per il corso di laurea triennale in Biotecnologie Mediche, Università degli Studi di Milano.

**2018-2019/2019-2020**

Tutor per il laboratorio del corso "Molecular biology applied to biotechnology" (Prof. Massimiliano Pagani) per il corso di laurea magistrale in Medical Biotechnology and Molecular Medicine

**2018-2019/2019-2020**

Supporto alla gestione logistica del Master in Bioinformatics and Functional Genomics, Università degli Studi di Milano / INGM (Coordinatore: Prof. Massimiliano Pagani)

**2018-2019**

Docente del modulo "Structural Biology" del Master in Bioinformatics and Functional Genomics, Università degli Studi di Milano / INGM (Coordinatore: prof. Massimiliano Pagani)

**2017-2018**

Tutor del corso "Cells molecules and genes", International Medical School, Università degli Studi di Milano

**2010**

Docente del Corso specialistico della Scuola Nazionale di NMR, 09.2010, Torino, Italia.

## **ISTRUZIONE E FORMAZIONE**

**11/2008**

Dottorato di Ricerca in Biologia Cellulare e Molecolare  
Università "Vita Salute - S.Raffaele" / Open University International PhD Program  
Sede ospitante: DIBIT (Ospedale San Raffaele, Milano, Italia), Laboratorio di NMR Biomolecolare  
Direttore scientifico e supervisore: Dott.ssa Giovanna Musco  
Co-supervisori: Prof. Marco Bianchi, Prof. Mike Williamson

**03/2002**

Laurea in Chimica  
Università degli Studi di Milano, Italia  
Sede ospitante: Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica.  
Relatore: Dott. Marco Scavini  
Votazione: 106/110

**07/1996**

Diploma di Maturità Scientifica  
Liceo Scientifico "G.B.Grassi", Saronno, Italia  
Votazione: 60/60

## **COMPETENZE PROFESSIONALI**

### ***Chimica fisica computazionale***

Dinamica molecolare classica, docking molecolare, simulazioni di sistemi molecolari con metodi Montecarlo classici, simulazioni di sistemi molecolari con metodi basati sulla teoria del funzionale di densità (density functional theory, DFT).

### ***Chimica fisica biologica sperimentale/Biofisica***

Spettroscopia NMR multidimensionale per proteine, dicroismo circolare, spettroscopia di fluorescenza.

### ***Biologia Computazionale/Bioinformatica***

Analisi di dati di trascrittoma massiva tramite metodi diretti ("de novo" RNA sequencing), analisi di dati di trascrittoma a singola cellula (single cell RNA sequencing). Applicazione di metodi di inferenza statistica (network inference, NI) a dati "omici" di trascrittoma.

### ***Chimica-fisica dello stato solido***

Diffrazione a raggi X per polveri, sintesi allo stato solido, analisi termogravimetrica (TGA, DSC), microscopia ottica ed elettronica a scansione, conduttimetria.

## **COMPETENZE INFORMATICHE**

### ***Competenze informatiche generali***

Conoscenza approfondita della gestione avanzata dei sistemi operativi Linux e Microsoft Windows e dei loro più comuni applicativi; conoscenza degli strumenti di amministrazione e personalizzazione d'uso dei sistemi operativi Linux per singolo utente e per gruppi di utenti attraverso reti locali. Conoscenza approfondita dello scripting e della programmazione/gestione dei dati e dei sistemi operativi nei più comuni linguaggi e ambienti principalmente per sistemi operativi Linux: Awk, Bash Native Language, Perl (conoscenza avanzata); C, Fortran 77 e Python (conoscenza di base). Buona conoscenza dell'hardware dei calcolatori.

### ***Competenze informatiche specifiche***

Chimica computazionale: GROMACS, BiKi, NAMD (dinamica molecolare); SimRNA, CAMPARI (simulazioni molecolari Montecarlo); SwissModel, MODELLER, ROSETTA (modellizzazione per omologia di strutture di proteine); HADDOCK, ZDOCK, AutoDock(docking molecolare); Dalton, CPMD (calcoli quantomeccanici "ab initio").

Spettroscopia NMR: Topspin, VnmrJ (acquisizione di dati); CCPNMR, NMRDraw/NMRPipe, NMRView, Sparky (processazione, visualizzazione e assegnamento di spettri); TENSOR2, MODULE, PALES, SPARTA+, SHIFTS, SHIFTX (analisi ed interpretazione molecolare di spettri).

Visualizzazione molecolare: VMD, Avogadro, Pymol.

Analisi di dati di trascrittomico massiva: Trinity ("de novo" RNAseq).

Analisi statistica di dati di trascrittomico a singola cellula: CellRanger, pySCENIC (network inference).

Analisi, elaborazione e visualizzazione di dati numerici: Gnuplot, Xmgrace, Scilab, Octave, Excel.

## **CONOSCENZE LINGUISTICHE**

Italiano: lingua madre

Inglese: ottima conoscenza della lingua scritta e parlata

Francese: buona conoscenza della lingua scritta, ottima conoscenza della lingua parlata.

## **ULTERIORI INFORMAZIONI**

### ***Abilitazioni scientifiche nazionali***

Abilitazione Scientifica Nazionale 2017-2026 a professore di II fascia nel settore disciplinare 03/A2 (Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche)

Abilitazione Scientifica Nazionale 2018-2027 a professore di II fascia nel settore disciplinare 05/E1, (Biochimica Generale)

Abilitazione Scientifica Nazionale 2018-2027 a professore di II fascia nel settore disciplinare 02/D1 (Fisica Applicata, Didattica e Storia della Fisica)

### ***Attività editoriali***

Topic Editor ("Protein dynamics and molecular recognition at the crossroad between experiments and theory") per la rivista internazionale "Frontiers in Molecular Biosciences"

Revisore per riviste scientifiche internazionali (Current Computer-Aided Drug Design, PLOS One, Scientific Reports)

## ***Pubblicazioni scientifiche***

38 (pubblicazioni degli ultimi 10 anni: 29; pubblicazioni come primo autore: 9; pubblicazioni come "corresponding author": 4; H index: 19; H index decennale: 26; numero totale di citazioni:1750; citazioni degli ultimi 5 anni: 941; fonte Google Scholar)

## ***Premi e riconoscimenti***

Marie Curie Fellowship, 2011-2013

Bruker fellowship, XI Chianti Workshop on Magnetic Resonance, 2007, Vallombrosa, Italy.

EMBO fellowship, NMR Practical Course, 2005, Basilea, CH.

## ***Partecipazioni a congressi scientifici***

**05.09.2016 - 07.09.2016**

15th National Congress on Magnetic Resonance (GIDRM), Modena, Italia

"Protein dynamics and NMR observables: new approaches from enhanced sampling methods"(relatore invitato, presentazione orale)

**16.10.2015**

GIDRM - NMR Day on drug discovery and delivery: new approaches, Genova, Italia (organizzatore)

**22.09.2015 - 25.09.2015**

CECAM Workshop: Computational Advances in Drug Discovery, Losanna, CH.

"Kinetics of protein-ligand unbinding via smoothed potential molecular dynamics simulations" (poster)

**10.06.2014 - 12.06.2014**

CECAM Workshop: Binding free energy and kinetics: computation meets experiments, Genova, Italia.

"In Silico Prediction of Protein Unbinding Kinetics Using Smoothed Potentials"(relatore invitato, presentazione orale)

**21.11.2013**

Natta's Seeds Grow, Milano, Italia

"Atomic-Resolution Structural Dynamics in Crystalline Proteins from NMR and Molecular Simulation".

Milano, Italia (poster)

**24.09.2012 - 26.09.2012**

CECAM Workshop: Exploring Protein Interactions through Theory and Experiment, Losanna, CH.

"Multi-timescale dynamics of crystalline proteins investigated using molecular dynamics simulations and high resolution solid state NMR spectroscopy" (relatore invitato, presentazione orale)

**17.06.2012 - 22.06.2012**

12th Chianti.INSTRUCT Workshop on BioNMR, Electron and Nuclear Relaxation for - Structural Biology Montecatini Terme, Italia.

"Atomic-Resolution Structural Dynamics in Crystalline Proteins from NMR and Molecular Simulation" (poster)

**14.12.2008 - 18.12.2008**

NMR to lay the bricks for molecular systems biology, Montecatini Terme, Italia

"The anti-inflammatory effect of Glycyrrhizin and its interactions with extracellular HMGB1 revealed by NMR and MD"(poster)

**03.06.2007 - 08.06.2007**

11th Chianti Workshop on Magnetic Resonance, Vallombrosa, Italia

"Glycyrrhizin Binds to High Mobility Group Box 1 Protein (HMGB1) and Inhibits its Cytokine Activities"(poster)

### ***Competenze organizzative e gestionali***

Co-supervisore di 1 tesi di dottorato in Scienze biotecnologiche e farmaceutiche (Università degli Studi di Bologna, 30° ciclo, 2014-2018)

Correlatore di 1 tesi di laurea magistrale in Biotecnologie Molecolari e Industriali (Università degli Studi dell'Insubria, 2014/2015) e di 1 tesi di laurea magistrale in Biotecnologie Mediche e Industriali (Università degli Studi di Milano - Bicocca, 2006/2007)

Tutor di 2 studenti in tirocinio di tesi (in Fisica e in Biotecnologie Mediche e Industriali, Università degli Studi di Milano - Bicocca) durante il periodo lavorativo 2003-2010

Amministratore di sistema (Linux) di macchine calcolatrici per uso scientifico (2003 - presente)

Supporto tecnico per la raccolta, la gestione e l'analisi dei dati da spettroscopia NMR (2003 - 2010)

## **APPENDICE 1**

### **LISTA CRONOLOGICA DEI PROGETTI SVOLTI E DELLE COLLABORAZIONI AVUTE IN CARRIERA**

**Marzo 2018 - presente (Istituto Nazionale di Genetica Molecolare (INGM), Milano, Italia / Dipartimento di Biotecnologie Mediche e Medicina Traslazionale, Università degli Studi di Milano, Italia)**

1. Sviluppo e applicazione di metodologie computazionali per la predizione e la caratterizzazione della formazione di triple eliche di acidi nucleici nell'ambito dello studio di RNA non codificanti in e del loro ruolo nella regolazione genica
2. Applicazione dell'analisi di dati di trascrittoma a singola cellula (single cell RNA sequencing) tramite metodi di inferenza statistica (network inference, NI) allo studio della risposta immune nei tumori umani e autoimmuni.
3. Sviluppo e applicazione di metodologie computazionali strutturali per la predizione e l'analisi dei complessi formati da recettori delle cellule T, antigeni e complesso maggiore di immunità (MHC) per la determinazione dei determinanti molecolari della modulazione della risposta immunitaria.
4. Studio della plasticità strutturale di proteine prioniche umane in funzione di mutazioni patologiche e meccanismo di riconoscimento da parte di "nanobody" di interesse diagnostico/terapeutico.

**Febbraio 2014 - gennaio 2018 (Istituto Italiano di Tecnologia, Genova, Italia)**

1. Sviluppo di metodologie computazionali per lo studio e la predizione della cinetica di dissociazione dei complessi farmaco-proteina.
2. Studio computazionale della interazione VAC acilasi con una famiglia di cefalosporine e della corrispondente cinetica di associazione e dissociazione.
3. Studio computazionale della dimerizzazione della D-amminoacido ossidasi umana (hDAAO) e della sua interazione con molecole di interesse farmacologico per la cura della schizofrenia e del dolore cronico.
4. Caratterizzazione computazionale della cinetica e della termodinamica di interconversione tra strutture transienti in soluzione della proteina nucleare intrinsecamente disordinata N-TAIL del virus Sendai.
5. Studio cristallografico e computazionale dell'interazione tra la fosfodiesterasi umana e una famiglia di suoi inibitori.

**Aprile 2010 - gennaio 2014 (Institut de Biologie Structurale, Grenoble, Francia)**

1. Sviluppo di metodi numerici per l'interpretazione quantitativa di misure NMR relative a proteine strutturate (SH2, SH3, ubiquitina) allo stato liquido e solido.
2. Simulazioni di proprietà magnetiche di catene polipeptidiche tramite simulazioni quantomeccaniche (DFT).
3. Studi spettroscopici (NMR) e computazionali di proteine intrinsecamente disordinate (IDP) coinvolte nella interazione ospite-patogeno e nell'infezione virale.
4. Studi computazionali di potenziale di forza media nell'ambito della caratterizzazione "in silico" di polimeri di interesse farmaceutico e ambientale.

**Maggio 2003 - febbraio 2010 (DIBIT-Ospedale S.Raffaele, Milano, Italia)**

1. Studi strutturali sperimentali e computazionali di HMGB1 e dei suoi complessi con molecole di origine naturale con azione antinfiammatoria (glicirrizina, carbenoxolone).
2. Studi strutturali sperimentali dei domini PHD finger di AIRE e dei complessi da essi formati nell'ambito della sindrome poliendocrina autoimmune di tipo 1 (APECED).
3. Studi "in silico" della interazione tra domini discoidei di interesse patologico (retinoschisina, trombosin) e la superficie del doppio strato lipidico.
4. Modellistica molecolare dell'eterodimero apolipoproteina AI (Milano) - AII e delle sue interazioni con il doppio strato lipidico (dischi lipidici).

5. Modelli computazionali di “unfolding” in urea della  $\beta$ -lattoglobulina umana.
6. Analisi delle caratteristiche strutturali di riconoscimento anticorpale CD4-gp120 nell’ambito della resistenza naturale all’HIV.

**Luglio 2002 - maggio 2003 (Istituto di Ricerche Farmacologiche “Mario Negri”, Milano, Italia)**

1. Studi strutturali di aggregazione di peptide di sintesi corrispondenti a frammenti della proteina prionica umana.
2. Aspetti strutturali della regolazione ossidoriduttiva della ciclofillina A per effetto della glutathionilazione.



## APPENDICE 2

### LISTA CRONOLOGICA COMPLETA DI PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE SU RIVISTE “PEER REVIEWED”

(\*: “corresponding author”)

1. M.Mella, A.Tagliabue, L.Mollica, L.Izzo. **Monte Carlo study of the effects of macroion charge distribution on the ionization and adsorption of weak polyelectrolytes and concurrent counterion release**, J. of Coll. and Interf. Sci., 560, 667-680, 2020.
2. M.Bernetti, E.Rosini, L.Mollica\*, M.Masetti, L.Pollegioni, M.Recanatini and A.Cavalli, **Binding residence time through scaled molecular dynamics: a prospective application to hDAAO inhibitors** J. Chem. Inf. Model., 58 (11), 2255-2265, 2018.
3. F.Arrigoni, T.Prodocimi, L.Mollica, G. Zampella, L.De Gioia and L.Bertini, **Copper reduction and dioxygen activation in Cu-Amyloid Beta peptide complexes. Insight from molecular modelling**, accepted for publication on Metallomics, 10, 1618-1630, 2018.
4. T.Prodocimi, L.Mollica, S.Donini, M.S.Semrau, A.P.Lucarelli, E.Aiolfi, A.Cavalli, P.Storici, S.Alfei, C.Brullo, O.Bruno, and E.Parisini, **Molecular bases of PDE4D inhibition by GEBR-library compounds for cognitive amelioration in Alzheimer’s disease**, Biochemistry, 57 (19), 2876-2888, 2018.
5. M.Bernetti, M.Masetti, F.Pietrucci, M.Blackledge, M.Ringkjobing Jensen, M.Recanatini, L.Mollica\* and A.Cavalli, **Structural and kinetic characterization of the intrinsically disordered protein SeV NTAIL through enhanced sampling simulations**, J.Phys.Chem.B, 121, 9572-9582, 2017.
6. M.Bernetti, A.Cavalli, L.Mollica\*, **Protein-ligand (un)binding kinetics as a new paradigm for drug discovery at the crossroad between experiments and modelling**, MedChemComm, 8, 534-550, 2017.
7. L.Mollica, L.M.Bessa, X.Hanouille, M.Ringkjøbing Jensen, M.Blackledge, R.Schneider, **Binding mechanisms of intrinsically disordered proteins: theory, simulation, and experiment**, Frontiers of Molecular Biosciences, 3, 2016.
8. 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 and A.Cavalli, **Molecular Dynamics Simulations and Kinetic Measurements to Estimate and Predict Protein-Ligand Residence Times**, J. Med. Chem., 59 (15), 7167-7176, 2016.
9. L.Mollica\*, G.Conti, L.Pollegioni, A.Cavalli, E.Rosini, **Unveiling the Atomic-Level Determinants of Acylase-Ligand Complexes: An Experimental and Computational Study**, J. Chem. Inf. Model. 55(10):2227-41, 2015.
10. L.Mollica, S.Decherchi, S.R.Zia, R.Gaspari, A.Cavalli and W.Rocchia, **Kinetics of protein-ligand unbinding via smoothed potential molecular dynamics simulations**, Sci. Rep., 5, 2015.
11. L.Izzo, M.Mella, L.Mollica, **Influence of charged intramolecular hydrogen bonds in weak polyelectrolytes: A Monte Carlo study of flexible and extendible polymeric chains in solution and near charged spheres**, J. Pol. Sci. Part B: Polymer Physics, 53 (9), 650, 2015.
12. F.Pietrucci, L.Mollica, M.Blackledge, **Mapping the native conformational ensemble of proteins from a combination of simulations and experiments: new insight in the src-SH3 domain**, J.Phys.Chem.Lett., 4, 1943, 2013.

13. P.Guerry, L.Mollica, M.Blackledge, **Mapping Protein Conformational Energy Landscapes using NMR and Molecular Simulation**, Phys. Chem.Chem.Phys., 14, 3046, 2013.
14. P.Guerry and L.Salmon, L.Mollica, J.L. Ortega Roldan, P.Markwick, N.A.J. van Nuland, J.A.McCammon and M. Blackledge, **Mapping the Population of Protein Conformational Energy Sub-states from NMR Dipolar Couplings**, Angew. Chem. Int. Ed. Engl., 52(11), 3181-3185, 2013.
15. L.Mollica, M.Baias, J.R.Lewandowski, B.J.Wylie, L.J.Sperling, C.M.Rienstra, L.Emsley, and M.Blackledge, **Atomic-Resolution Structural Dynamics in Crystalline Proteins from NMR and Molecular Simulation**, J.Phys.Chem.Lett., 3(23), 3657-3662, 2012.
16. M.Gaetani and V.Matafora, M.Saare, D.Spiliotopoulos, L.Mollica, G.Quilici, F.Chignola, V.Mannella, C.Zucchelli, P.Peterson, A.Bachi and G.Musco, **AIRE-PHD fingers are structural hubs to maintain the integrity of chromatin-associated interactome**, Nuc.Ac.Res., 40(22), 11756-68, 2012.
17. L.Salmon, L.Pierce, A.Grimm, J.L.Ortega Roldan, L.Mollica, M.R.Jensen, N.van Nuland, P.R.Markwick, J.A.McCammon, M.Blackledge, **Multi-timescale conformational dynamics of the SH3 domain of CD2-associated protein using NMR spectroscopy and accelerated molecular dynamics**, Angew. Chem. Int. Ed. Engl., 51(25):6103-62012, 2012.
18. A.Naldoni, L.Mollica and V.Dal Santo, **Nanoparticle-Protein Conjugates for Nanomedicine Applications: Design and Engineering at the Nano-Bio Interface**, Recent Patents in Nanomedicine, 17-33, 2012.
19. R.Schneider, J.Huang, M.Yao, G.Communie, V.Ozenne, L.Mollica, L.Salmon, M.R.Jensen and M.Blackledge, **Towards a robust description of intrinsic protein disorder using nuclear magnetic resonance spectroscopy**, Mol. BioSyst., 8, 58-68, 2012.
20. T.Tosi, N.N.Nickerson, L.Mollica, M.R.Jensen, M.Blackledge, B.Baron, P.England, A.P.Pugsley, A.Dessen, **Pilotin-secretin recognition in the type II secretion system of Klebsiella oxytoca**, Mol. Microbiol., 82(6), 1422-32, 2011.
21. M.R.Jensen, G.Communie G, E.A.Ribeiro, N.Martinez, A.Desfosses, L.Salmon, L.Mollica, F.Gabel, M.Jamin, S.Longhi, R.W.Ruigrok, M.Blackledge, **Intrinsic disorder in measles virus nucleocapsids**, Proc.Natl.Acad.Sci.U.S.A. 108(24) (2011), 9839-44.
22. L.Mollica, G.Morra, G.Colombo, G.Musco, **HMGB1-carbenoxolone interactions: dynamics insights from combined nuclear magnetic resonance and molecular dynamics**, Chem. Asian J., 6(5) (2011), 1171-80.
23. D.Breda, L.Mollica, E.Luison and S.E.Burastero, **HIV and the Sharpen Edge Between Protective and Pathogenic Immune Responses to the CD4 Self Antigen**, The Open Autoimmunity Journal, 2, 96-103, 2010.
24. C.Wodarczyk, G.Distefano, I.Rowe, M.Gaetani, B.Bricoli, M.Muorah, A.Spitaleri, V.Mannella, P.Ricchiuto, M.Pema, M.Castelli, A.E.Casanova, L.Mollica, M.Banzi, M.Boca, C.Antignac, S.Saunier, G.Musco, A.Boletta, **Nephrocystin-1 forms a complex with polycystin-1 via a polyproline motif/SH3 domain interaction and regulates the apoptotic response in mammals**, PLoS One, 5(9) (2010), e12719.
25. S.Trifari, S.Scaramuzza, M.Catucci, M.Ponzoni, L.Mollica, R.Chiesa, F.Cattaneo, F.Marangoni, M.Bosticardo, C.Doglionni, A.Aiuti, A.Villa, M.G. Roncarolo and L.Dupré, **Molecular Analysis of a mutant Wiskott-Aldrich syndrome protein in T cells and lymphoid tissues of a revertant Wiskott-Aldrich syndrome patient**, The Journal of Allergy and Clinical Immunology, 125(2), 439-

448, 2010.

26. M.Scavini, M.Coduri, M.Allieta, L.Mollica, M.Brunelli, L.Malavasi, A.Lascialfari, C.Ferrero, **Effect Of Local Disorder On The Transport Properties Of Al-Doped SmBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6+d</sub> Superconductors**, Journal Of Physical Chemistry. C, 114(45),19509-19520, 2010.

27. S.E.Burastero, M.Figini, B.Frigerio, P.Lusso, L.Mollica and L.Lopalco, **Protective versus pathogenic anti-CD4 immunity: insights from the study of natural resistance to HIV infection**, J Transl Med. 7 (2009), 101.

28. F.Chignola, M.Gaetani, A.Rebane, T.Org, L.Mollica, C.Zucchelli, A.Spitaleri, V.Mannella, P.Peterson, G.Musco, **The solution structure of the first PHD finger of autoimmune regulator in complex with non-modified histone H3 tail reveals the antagonistic role of H3R2 methylation**, Nucleic Acids Res., 37(9) (2009), 2951-61.

29. L.Mollica, A.Curioni, W.Andreoni, M.E.Bianchi and G.Musco, **The binding domain of the Carboxolone inhibitor of HMGB1: theory and experiment**, Chem.Phys.Lett., 456 (2008), 236-242.

30. T.Org, F. Chignola, C. Hetaenyi, M.Gaetani, A.Rebane, I.Liiv, U. Maran, L.Mollica, M.J. Bottomley, G.Musco and P.Peterson, **The Autoimmune Regulator PHD finger binds non-methylated Histone H3K4 to activate gene expression**, EMBO R., 9 (2008), 370-376.

31. A.Guerini Rocco, L.Mollica, P.Ricchiuto, A.M.Baptista, E.Gianazza and I.Eberini, **Characterization of the protein unfolding processes induced by urea and temperature**, Biophysical Journal, 94 (2007), 2241-2251.

32. L.Mollica, F.De Marchis, C.Dallacosta, D.Pennacchini, M.Zamai, A.Agresti, L.Trisciuglio, M.E.Bianchi and G.Musco, **Glycyrrhizin binds to high mobility group box 1 protein (HMGB1) and inhibits its cytokine activities**, Chemistry and Biology, 14 (4) (2007) 431-441.

33. A.Guerini Rocco, L.Mollica, E.Gianazza, L.Calabresi, G.Franceschini, C.R.Sirtori and I.Eberini, **A model structure for the heterodimer apoA-I Milano / apoAII supports its peculiar susceptibility to proteolysis**, Biophysical Journal, 91(8) (2006) 3043-9.

34. L.Mollica, F.Fraternali and G.Musco, **Interactions of the C2 domain of human factor V with a model membrane**, Proteins 64(2) (2006), 363-75.

35. P.Ghezzi, S.Casagrande, T.Massignan, E.Bellacchio, I.Eberini, E. Gianazza, L.Mollica, M.Fratelli, M.Salmona, B.Sherry, V.Bonetto, **Redox regulation of cyclophilin A by glutathionylation**, Proteomics, 6(3) (2005) 817-825.

36. L.Malavasi, L.Mollica and M.Scavini, **Transport properties of Al doped SmBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6+d</sub> superconductor. Part I: oxygen non-stoichiometry and diffusion**, Sol. State. Science, 6 (2004) 1187-1194.

37. M.Salmona, M.Morbin, T.Massignan, L.Colombo, G.Mazzoleni, R. Capobianco, F.Thaler, L.Mollica, G.Musco, J.J.Kourie, O.Bugiani, D. Sharma, H.Inouye, D.A.Kirschner, G.Forloni, and F.Tagliavini, **Structural properties of Gerstmann-Sträussler-Scheinker disease amyloid protein**, Journal of Biological Chemistry, 278(48) (2003), 48146-53.

38. M.Scavini, L.Mollica, R.Bianchi, G.A.Costa, M.Ferretti, P.Mele, A. Ubaldini, P.Ghigna, L.Malavasi and P.Mustarelli, **Characterisation of Al defects in SmBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>-xAlxO<sub>6+d</sub> superconductor**, Journal of Modern Physics B, 17(2003), 936-941.