

INFORMAZIONI PERSONALI **Luca Maragliano**

TITOLO DI STUDIO **Phd**

ESPERIENZA
PROFESSIONALE

01/11/2011–alla data attuale

Researcher

Istituto Italiano di Tecnologia, Genova (Italia)

Attività di ricerca: modellizzazione computazionale e simulazioni atomistiche di Dinamica Molecolare per lo studio della funzione di proteine neuronali (PRRT2, sinapsina), canali ionici transmembrana (canali sodio e potassio a voltaggio dipendenti) e paracellulari (canali di claudine), pompe protoniche (ATPasi vacuolare).

01/2008–10/2011

Postdoc (Research Associate)

Department of Biochemistry and Molecular Biology, University of Chicago, Chicago (Stati Uniti d'America)

Attività di ricerca: simulazioni atomistiche di Dinamica Molecolare classica, applicazioni a canali ionici, sviluppo di metodologie per la simulazione e la quantificazione di processi attivati in biofisica e fisiologia; Studio della transizione conformazionale del dominio a voltaggio dipendente del canale potassio Kv1.2.

01/2005–01/2008

Postdoc (Research Associate)

Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, New York (Stati Uniti d'America)

Attività di ricerca: Sviluppo di metodologie per la simulazione atomistica di processi attivati in biofisica, applicazioni a diffusione di ligandi in mioglobina.

03/2004–10/2004

Postdoc

CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire), Lyon (Francia)

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

01/01/2001–31/12/2003

Dottorato di Ricerca in Fisica

Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia

Titolo della Tesi: *Methods and Applications of Molecular Dynamics Simulations to Biomolecules*.

26/10/2000

Laurea in Fisica, indirizzo BIOFISICA

Università degli Studi di Roma La Sapienza

Titolo della Tesi: *Stabilità delle Proteine Termofile con la Dinamica Molecolare*

ULTERIORI INFORMAZIONI

Attività didattica

Membro del Collegio dei Docenti del Corso di Dottorato "Neuroscienze", Curriculum "Neuroscienze e Neurotecnologie", Università di Genova/IIT

Studenti supervisionati:

Ciclo XXXII: Giulio Alberini, Titolo della Tesi: "*Targeting Tight Junctions in Nanomedicine: a Molecular Modeling Perspective*";

Ciclo XXIX: Mahad Gatti, Titolo della Tesi: "*Computational Modeling and Simulations of Optogenetic Probes to Modulate Gene Expression*".

AA 2016/17; 2017/18; 2018/19 – Corso per studenti di Dottorato IIT/Università di Genova: “*Molecular structure of the synapse*”.

AA 2015/16; 2016/17; 2017/18; 2018/19 – Co-responsabile (con il Prof. F. Benfenati) dell'organizzazione del corso "Informatica e nuove tecnologie per la Medicina", Il anno del CdL in Medicina, Università di Genova. Lezioni tenute nel corso: “*Dalla composizione atomica alla funzione biologica delle proteine attraverso simulazioni di Dinamica Molecolare*” (AA 2015/16, 2016/17 e 2017/18); “*Basi strutturali dei segnali elettrici neuronali*” (AA 2018/19).

AA 2001/2; 2002/3 – Corso di Meccanica Statistica, III anno del CdL in Fisica, Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia.

Partecipazione a progetti di ricerca finanziati

2019-2022 Collaboratore, Telethon project GGP19120 "Interaction of PRRT2 with Na⁺ channels: pathogenetic basis and new targets for the cure of PRRT2-associated paroxysmal disorders"; Ruolo nel progetto: responsabile del Task2.1, Aim 2: "Computational/experimental identification of PRRT2/Nav1.6 transmembrane interacting surfaces"

2019 Responsabile Unità Operativa IIT-NSYN, Progetto 5x1000 IRCCS Ospedale Policlinico San Martino “Glioblastoma: superare le resistenze”. (Attività di ricerca dell'unità operativa: studio della permeabilità ai farmaci della barriera ematoencefalica attraverso modelli computazionali e *in vitro*; responsabile per 11.300 €).

2016-2019 Co-Pi, Progetto finanziato dalla Compagnia di San Paolo "Modulazione della plasticità corticale visiva attraverso il controllo optogenetico della espressione genica" (Ruolo ricoperto: modellizzazione e simulazioni di sonde proteiche fotosensibili e dei loro interattori; responsabile per 34.000 €).

2016-2019 Collaboratore, Progetto finanziato dalla Compagnia di San Paolo "PRRT2, un nuovo gene sinaptico collegato all'epilessia (Ruolo ricoperto: modellizzazione e simulazioni della proteina PRRT2 e dei suoi interattori sinaptici).

2016-2020 Collaboratore in progetto GRAPHENE FET FLAGSHIP, Graphene-Driven Revolutions in ICT and Beyond, ICT Call 2013, FP7-ICT-2013-FET-F, Core project 1 (2016-2018) and 2 (2018-2020); WP4: Health & environment. Ruolo specifico: studio computazionale di interazioni tra grafene e biomolecole.

2014 Collaboratore in progetto CURE 2014 365 Innovator Award, titolo: "Optogenetic regulation of the transcription of epilepsy genes: an innovative strategy to cure drug-resistant epilepsy". Ruolo specifico: Modellizzazione e simulazione di sonde chimeriche fotosensibili e loro interattori.

2013-2016 Collaboratore in progetto Telethon GGP13033 "Role of the novel presynaptic protein PRRT2 in neuronal physiology and in the pathogenesis of paroxysmal neurological disorders". Ruolo specifico: Simulazione della proteina PRRT2 e interattori sinaptici.

2013-2015 Collaboratore in progetto PRIN n. 2010JFYFY2, titolo: "Excitatory/inhibitory balance in the central nervous system: synaptic transmission, plasticity and synaptopathies". Ruolo specifico: Simulazioni della proteina sinapsina e del meccanismo di legame con l'ATP.

2004, 2007 Destinatario borsa COST (European Science Foundation, Action P13), Short Term Scientific Mission Grant.

Seminari su invito

In evidenza

Ott 2019, International Workshop on Structure and Function of Ion Channels and Transporters, Sestri Levante

Nov 2015 2 Invited Lectures, Institute of Statistical Mathematics, Tokyo, Giappone

Nov 2014 Nosé Dynamics 30 Years Symposium, Keio University, Tokyo, Giappone

Feb 2014 Pasteur Institute, Parigi, Francia

Nov 2013 Workshop, Institute for Mathematical Sciences, NUS, Singapore

Lug 2012 Max Planck Institute of Biophysics, Francoforte, Germania

Lug 2011 7th Int. Congress on Industrial and Applied Mathematics - ICIAM 2011, Vancouver, Canada

Gen 2010 Department of Chemistry Seminar Series, Loyola University, Chicago, USA

Ott 2009 Computational Biology Colloquium, Courant Institute, New York University, USA

Altri

Mar 2019, Dipartimento di Fisica, Università di Trento; Giu 2016, ECMED Workshop, Genova, Italia; Dic 2014, Ligurian Bioinformatics Day, Genova, Italia; Set 2014, Olimpia Training Network School, Genova, Italia; Lug 2014, Advanced Biotechnology Center/IIT Joint Workshop, Genova, Italia; Giu 2014, CECAM Workshop, IIT Genova, Italia; Set 2013, Italian National Conference on Condensed Matter Physics, Milano, Italia (comunicazione); Giu 2012, CECAM Workshop, Ecole des Ponts, Champs-sur-Mame, Francia; Mag 2012, Dipartimento di Fisica, Università di Roma La Sapienza, Roma, Italia; Giu 2011, NIH Glue Grant Workshop, University of Chicago, USA; Mar 2011, BHSRI Research Institute, USA; Mar 2011, Italian Institute of Technology, Genova, Italia; Set 2010, School of Physics, University College Dublin, Irlanda; Lug 2010, Department of Informatics, University of Lugano, Svizzera; Apr 2009, Workshop, Department of Mathematics, Princeton University, USA; Feb 2008, Workshop, Erwin Schrödinger Institute for Mathematical Physics, Vienna, Austria; Nov 2007, ICES Seminar Series, University of Texas at Austin, USA; Ott 2007, Applied Math Seminar, Courant Institute, New York University, USA; Lug 2007, Atomistic Simulation Seminar, Dipartimento di Fisica, Università di Roma La Sapienza, Roma, Italia; Nov 2005, Amolf Institute, Amsterdam, NL; Set 2004, Biophysical Chemistry Laboratory, Université de Strasbourg, Francia; Mar 2004, CECAM-ENS, Lyon, Francia

Abilitazione Scientifica Nazionale

2018, Abilitazione Seconda Fascia, Settore Concorsuale 05/D1-Fisiologia

Pubblicazioni scientifiche

2020

33) Neuronal firing modulation by a membrane-targeted photoswitch

M.L. DiFrancesco, F. Lodola, E. Colombo, **L. Maragliano**, M. Bramini, G.M. Patern, P. Baldelli, M. Dalla Serra, L. Lunelli, M. Marchioretto, G. Grasselli, S. Cimò, L. Colella, D. Fazzi, F. Ortica, V. Vurro, C.G. Eleftheriou, D. Shmal, J.F. Maya-Vetencourt, C. Bertarelli, G. Lanzani and F. Benfenati
Nat. Nanotechnol. <https://doi.org/10.1038/s41565-019-0632-6>

2019

32) Synapsins are expressed at neuronal and non-neuronal locations in *Octopus vulgaris*

F. Maiole, G. Tedeschi, S. Candiani, **L. Maragliano**, F. Benfenati and L. Zullo
Scientific Reports, vol. 9, (no. 1)

2018

31) Molecular Dynamics simulations of ion selectivity in a claudin-15 paracellular channel.

G. Alberini, F. Benfenati and **L. Maragliano**
J. Phys. Chem. B. 2018, 122:10783–10792

30) Closed-locked and apo-resting state structures of the human $\alpha 7$ nicotinic receptor: a computational study.

L. Chiodo, T. Malliavin, S. Giuffrida, **L. Maragliano** and G. Cottone
J. Chem. Inf. Model. 2018, 58:2278-2293

29) De novo mutations of the ATP6V1A gene cause developmental encephalopathy with epilepsy.

A. Fassio, A. Esposito, M. Kato, H. Saitsu, D. Mei, C. Marini, V. Conti, M. Nakashima, N. Okamoto, A. Olmez Turker, B. Albus, C. N. Semerci Gündüz, K. Yanagihara, E. Belmonte, **L. Maragliano**, K. Ramsey, C. Balak, A. Siniard, V. Narayanan, C4RCD Research Group, C. Ohba, M. Shiina, K. Ogata, N. Matsumoto, F. Benfenati and R. Guerrini
Brain 2018, 141:1703-1718

28) The effect of intercalated water on potassium ion transport through Kv1.2 channels studied via on-the-fly free-energy parametrization.

S.A. Paz, **L. Maragliano** and C.F. Abrams
J. Chem. Theory Comp. 2018, 14:2743-2750

27) Interfacing Graphene-Based Materials With Neural Cells. (Review)

M. Bramini, G. Alberini, E. Colombo, M. Chiacchiaretta, M.L. Di Francesco, J.F. Maya-Vetencourt, **L. Maragliano**, F. Benfenati and F. Cesca
Front. Syst. Neurosci. 2018, 12:12

2017

26) A refined model of claudin-15 tight junction paracellular architecture by molecular dynamics simulations.

G. Alberini, F. Benfenati and **L. Maragliano**
PLOS ONE, 2017, 12:e0184190

25) A possible desensitized state conformation of the human $\alpha 7$ nicotinic receptor: A molecular dynamics study.

L. Chiodo, T.E. Malliavin, **L. Maragliano** and G. Cottone
Biophys. Chem. 2017, 229:99-109

24) Optogenetic modulation of intracellular signalling and transcription: a focus on neuronal plasticity.
(Review)

C. Eleftheriou, F. Cesca, **L. Maragliano**, F. Benfenati and J.F. Maya-Vetencourt
J. Exp. Neurosci. 2017, 11:1179069517703354

2016

23) Novel topology of Proline-Rich Transmembrane Protein 2 (PRRT2): hints for an intracellular function at the synapse.

P. Rossi, B. Sterlini, E. Castroflorio, A. Marte, F. Onofri, F. Valtorta, **L. Maragliano**, A. Corradi and F. Benfenati
J. Biol. Chem. 2016, 291:6111-23

22) Regulation of neural gene transcription by optogenetic inhibition of the RE1-Silencing Transcription Factor .

F. Paonessa, S. Criscuolo, S. Sacchetti, D. Amoroso, H. Scarongella, F. Pecoraro Bisogni, E. Carminati, G. Pruzzo, **L. Maragliano**, F. Cesca and F. Benfenati
Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., 2016, 113:E91

2015

21) Extended phase-space methods for enhanced sampling in molecular simulations: a review.

H. Fujisaki, K. Moritsugu, Y. Matsunaga, T. Morishita and **L. Maragliano**
Front. Bioeng. Biotechnol. 2015, 3:125

20) A structural model of the human $\alpha 7$ nicotinic receptor in an open conformation.

L. Chiodo, T.E. Malliavin, **L. Maragliano**, G. Cottone and G. Ciccotti
PLOS ONE, 2015, 10:e0133011

19) Temperature accelerated molecular dynamics with soft-ratcheting criterion orients enhanced sampling by low-resolution information.

I. Cortes-Ciriano, G. Bouvier, M. Nilges, **L. Maragliano** and T.E. Malliavin
J. Chem. Theory Comp., 2015, 11:3446-54

18) Identification and expression of acetylcholinesterase in Octopus vulgaris arm development and regeneration: a conserved role for AChE?

S.M. Fossati, S. Candiani, M.-T. Nodl, P. Domingues, **L. Maragliano**, M. Pennuto, F. Benfenati, M. Pestarino and L. Zullo
Mol. Neurobiology, 2015, 52:45-56

2014

17) Functional role of ATP binding to Synapsin I in synaptic vesicle trafficking and release dynamics.

M. Orlando, G. Lignani, **L. Maragliano**, A. Fassio, F. Onofri, P. Baldelli, S. Giovedì and F. Benfenati
J. Neurosci., 2014, 34:14752-14768

16) Temperature Accelerated Molecular Dynamics gives insights into globular conformations sampled in the free state of the AC catalytic domain.

E. Selwa, T. Huynh, G. Ciccotti, **L. Maragliano*** and T.E. Malliavin*
Proteins: Struct., Funct., Bioinf., 2014, 82:2483-2496 (*co-last authors)

15) Conformational changes in acetylcholine binding protein investigated by Temperature Accelerated Molecular Dynamics.

Z. M. Hoseyni, T.E. Malliavin, **L. Maragliano**, G. Cottone and G. Ciccotti
PLOS ONE, 2014, 9:e88555

14) Comparison of mean forces and swarms-of-trajectories string methods.

L. Maragliano, B. Roux and E. Vanden-Eijnden
J. Chem. Theory Comp., 2014, 10:524-533

2012

13) Direct imaging of DNA fibers: the visage of double helix.

F. Gentile, M. Moretti, T. Limongi, A. Falqui, G. Bertoni, A. Scarpellini, S. Santoriello, **L. Maragliano**, R. Proietti Zaccaria and E. Di Fabrizio
Nano Lett., 2012, 12:6453-6458

12) Intermediate state trapping of a Voltage-Sensor.

J.J. Lacroix, S.A. Pless, **L. Maragliano**, F.V. Campos, J.D. Galpin, C.A. Ahern, B. Roux and F. Bezanilla
J. Gen. Physiol., 2012, 140:635-652 (Cover article)

11) Calculation of Free Energy landscape in multi-dimensions with hamiltonian-exchange Umbrella

Sampling on petascale supercomputer.

W. Jiang, Y. Luo, **L. Maragliano** and B. Roux

J. Chem. Theory Comp., 2012, 8:4672-4680

10) "DFG-flip" in the insulin receptor kinase is facilitated by a helical intermediate state of the activation loop.

H. Vashisth, **L. Maragliano** and C. F. Abrams

Biophys. J., 2012, 102:1979-1987

2004-2011

9) Mapping the network of pathways of CO diffusion in myoglobin.

L. Maragliano, G. Cottone, G. Ciccotti and E. Vanden-Eijnden

J. Am. Chem. Soc., 2010, 132:1010-1017

8) Free energy and kinetics of conformational transitions from Voronoi tessellated milestone with restraining potentials.

L. Maragliano, E. Vanden-Eijnden and B. Roux

J. Chem. Theory Comp., 2009, 5:2589-2594

7) Single-sweep methods for free energy calculations.

L. Maragliano and E. Vanden-Eijnden

J. Chem. Phys., 2008, 128:184110 (Selected by Virtual Journal of Biological Physics Research)

6) On-the-fly string method for minimum free energy paths calculation.

L. Maragliano and E. Vanden-Eijnden

Chem. Phys. Lett., 2007, 446:182-190

5) A temperature accelerated method for sampling free energy and determining reaction pathways in rare events simulations.

L. Maragliano and E. Vanden-Eijnden

Chem. Phys. Lett., 2006, 426:168-175

4) String method in collective variables: minimum free energy paths and isocommittor surfaces.

L. Maragliano, A. Fischer, E. Vanden-Eijnden and G. Ciccotti

J. Chem. Phys., 2006, 125:024106

3) Experimental and simulative dissociation of dimeric Cu,Zn Superoxide Dismutase doubly mutated at the intersubunit surface.

L. Maragliano, M. Falconi, A. Sergi, P. Cioni, S. Castelli, A. Lania, G. Strambini, M. Ferrario and A. Desideri

Biophys. J., 2005, 88:2875-2882

2) Effective binding force calculation in dimeric proteins.

L. Maragliano, M. Ferrario and G. Ciccotti

Mol. Simul., 2004, 30:807-816

1) Atomic mean square displacements in proteins by Molecular Dynamics: a case for analysis of variance.

L. Maragliano, G. Cottone, L. Cordone and G. Ciccotti

Biophys. J., 2004, 86:2765-2772

Autorizzo la pubblicazione sul web