

Miguel A. SOLER

(aggiornato April 17, 2023)

DATI PERSONALI

DATA E LUOGO DI NASCITA 11 November 1982 | Murcia, Spain
NAZIONALITÀ Spagnola
LINGUE Spagnolo, madrelingua
Inglese, livello avanzato
Italiano, livello avanzato
Portoghese, livello avanzato
Tedesco, livello intermedio
INDIRIZZO: Università di Udine
Via delle Scienze 206, 33100 - Udine, Italia.
TELEFONO: +39 0432 558237
EMAIL: miguelangel.solerbastida@uniud.it
RESEARCHERID: J-2389-2013
ORCID: 0000-0002-5780-9949
WEB: uniud.it

ISTRUZIONE

GIU 2010 Ph.D. in CHIMICA TEORICA E COMPUTAZIONALE,
Università di Murcia, Spagna
Thesis: "Study of the Vibrational Relaxation of N-methylacetamide in water solution"
Supervisor: Profs. Alberto REQUENA and Adolfo BASTIDA
Voto: Sobresaliente *CUM LAUDE* (highest honor)

SETT 2005 Laurea in CHIMICA, Università di Murcia, Spagna
Thesis: "Estudio Computacional del Comportamiento Electrónico de Sales de 3-Metil-2metiltio-1,3,4-Tiadiazolio"
Supervisore: Arturo ESPINOSA
Voto: 8.65/10 | GPA: 3.65/4

PERFEZIONAMENTO PROFESSIONALE

27-28 Gen 2014 Short Winter School on Nano- and Biotechnology.
Università di Trieste, Italia.

7 May 2011 Workshop RESMOL of Molecular Reactivity and Solvation.
Università di Córdoba, Argentina.

7-12 Lug 2008 Summer School of Mixed Quantum-Classical Dynamics: Foundations and Application to Photo-Biological Questions.
Università di Vienna, Austria.

3-29 Sett 2007 Intensive Course in the European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling.
Universidad Autónoma de Madrid, Spagna. Mark: Very Good.

5-22 Sett 2004 Soggiorno di ricerca nel gruppo del Prof. Pere M. Deyà.
Universitat de les Illes Balears, Spagna.

ESPERIENZA PROFESSIONALE

- Attuale* - GENNAIO 2022 | Ricercatore a Tempo Determinato tipo A (RTDa) in Università di Udine, Udine, Italia
Incarico professionale: *Caratterizzazione della reattività di composti in liquidi ionici e deep eutectic solvents*
- DICEMBRE 2021 - SETTEMBRE 2018 | Ricercatore Collaboratore (Co.Co.Pro) in Istituto Italiano di Tecnologia (IIT), Genova, Italy
Incarico professionale: *research and methodological development related to the study and modulation of the biomolecular interaction in atomistic simulations*
- AGOSTO 2018 - LUGLIO 2017 | Ricercatore Collaboratore (Co.Co.Pro) in SISSA, Trieste, Italy
Incarico professionale: *Design of peptides for the molecular recognition of drugs by using molecular dynamics simulations, enhanced sampling simulations, data mining and clustering.* Finanziato da Associazione Italiana per la Ricerca sul Cancro (AIRC) 5xMILLE: Application of Advanced Nanotechnology in the Development of Cancer Diagnostics Tools (RIF. 12214, P.I: G. Toffoli, Col: A. Laio).
- GIUGNO 2017 - LUGLIO 2016 | Ricercatore Post-doc (assegnista, L. 240/2010) in SISSA, Trieste, Italia
Progetto: *Design of peptides via molecular simulations and data mining*, finanziato da Associazione Italiana per la Ricerca sul Cancro (AIRC) 5xMILLE: Application of Advanced Nanotechnology in the Development of Cancer Diagnostics Tools (RIF. 12214, P.I: G. Toffoli, Col: A. Laio).
- GIUGNO 2016 - GENNAIO 2014 | Ricercatore Post-doc (assegnista, L. 240/2010) in Università di Udine, Italia
Progetto: *Structural design of nanodevices based on assembled peptides*, finanziato da 7FP, Ideas, ERC Advanced Grant: Molecular Nanotechnology For Life Science Application: QUantitative Interactomics for Diagnostics, Proteomics and QUantitative Oncology, (Quidroquo) (proposal n. 269025, 2011-2016 PI: G. Scoles).
- DICEMBRE 2013 - OTTOBRE 2011 | Ricercatore Post-doc in Università di Lisbona, Portogallo
Progetto: *Insights into folding kinetics and designability of knotted proteins from lattice models*, finanziato da Fundação para a Ciência e a Tecnologia (PTDC/QUI-QUI/112358/2009, P.I: P. Faisca).

RICONOSCIMENTI E PREMI

- DEC 2017 | Abilitazione spagnola come "PROFESOR AYUDANTE DOCTOR" (*equivalente a una posizione RTDb, in base a DM 662/2016*) ANECA (Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación)
- APR 2016 | BORSA DI MOBILITÀ PER LA RICERCA n.19938/IV/15 (Fundación Seneca, 3000€) Università di Murcia, Spagna.
- APR 2011 | BORSA DI MOBILITÀ POST-DOC (CONICET, Argentina) Università di Quilmes, Buenos Aires, Argentina
- DEC 2010 | BORSA POST-DOC PER LA CONTINUITÀ DELLA RICERCA (2400€) Università di Murcia, Spagna
- APR 2006 | BORSA DI DOTTORATO (FPU, Spanish National Fellowship) Università di Murcia, Spagna

ATTIVITÀ DIDATTICA

- Feb–Giu 2023 Fisica per i Dispositivi IOT,
Feb–Giu 2022 Laurea in Internet of Things, Big Data, Machine Learning,
Università di Udine, Italia (10+16 ore).
- Sett 2022– Principi di Fisica,
Gen 2023 Laurea in Tecniche dell'Edilizia e del Territorio, Università di Udine, Italia
(48 ore)
- Feb–Giu 2022 Fisica con Laboratorio,
Lauree in Scienze Agrarie e in Scienze e Tecnologie Alimentari,
Università di Udine, Italia (15+15 ore)
- Feb–Giu 2009 Esperimenti in Chimica Fisica avanzata,
Laurea in Chimica, Università di Murcia, Spagna (30 ore)
- Feb–Jun 2009 Esperimenti in Chimica Fisica e Chimica Analitica,
Laurea in Ingegneria Chimica, Università di Murcia, Spagna (15 ore)
- Feb–Jun 2009 Chimica,
Laurea in Fisica, Università di Murcia, Spagna (15 ore)

COMMISSIONI DI FIDUCIA

- 2018 - **Peer Review** per JACS Au (ACS), Frontiers Molecular Biosciences (Frontiers), PeerJ (PeerJ), Entropy, International Journal of Molecular Sciences, Molecules, Biomolecules, Micromachines (MDPI).
- 2022 - **Review Editor** per Frontiers Molecular Biosciences (Frontiers) nell'area di Biological Modeling and Simulation.

INTERESSI DI RICERCA

Il mio attuale background in chimica fisica teorica e biofisica computazionale applicata a diversi sistemi molecolari mi offre l'opportunità unica di coprire un'ampia gamma di problemi e applicazioni, nella scienza di base, nella medicina o nell'industria. La mia tesi di dottorato a Murcia (Spagna) si è concentrata sulla simulazione multiscala del rilassamento vibrazionale dei peptidi in solventi liquidi, esplorando un'ampia gamma di tecniche di simulazione, come la dinamica molecolare, i trattamenti perturbativi ibridi quantistici/classici e le simulazioni ibride quantistiche/classiche. Queste competenze sono state perfezionate durante il mio soggiorno in Argentina in un progetto congiunto con A.Roitberg (AMBER, Gainesville, USA) e S.Tretiak (Los Alamos, USA) per studiare i meccanismi di trasferimento di energia nei dendrimeri. Motivato dall'esigenza di ampliare le mie conoscenze sui sistemi biologici e su ulteriori approcci computazionali, mi sono trasferito a Lisbona (Portogallo) per lavorare come postdoc nel campo del ripiegamento delle proteine. Qui ho sviluppato modelli coarse grain per studiare come le proteine con nodi fisici siano in grado di ripiegarsi nella loro struttura nativa. All'inizio del 2014 sono venuto in Italia per lavorare, prima nel gruppo di Prof.Scoles a Udine e successivamente nel gruppo di Prof.Laio alla SISSA (Trieste), in un approccio multidisciplinare per la progettazione di peptidi come sonde per il riconoscimento molecolare di proteine e farmaci. Questo periodo è stato fondamentale per migliorare il mio background in fisica statistica e per imparare tecniche computazionali più avanzate, come la dinamica molecolare a campionamento avanzato (enhanced sampling MD), il clustering o le simulazioni di calcolo in HPC. Inoltre, ho avuto l'opportunità di collaborare con ricercatori di diversi settori (medici, biologi molecolari o fisici sperimentali) e di partecipare allo sviluppo di un software per la progettazione di peptidi e frammenti di anticorpi come leganti (PARCE). Attualmente sto portando avanti nuovi progetti, sempre nel campo della biofisica delle proteine per applicazioni mediche, in cui viene spesso sfruttata la mia esperienza in questa intrigante relazione triangolare nelle proteine tra dinamica-struttura-funzione che ne regola il ruolo biologico.

PARTECIPAZIONE A PROGETTI DI RICERCA

- 2021-2025 Investigator Grant (IG), AIRC (IT), 409000 €, come COLLABORATORE.
Progetto: COMPUTATIONAL DESIGN OF THERAGNOSTIC NANOBODIES: TARGETING MISSENSE MUTANTS IN METASTATIC BREAST CANCER CELLS
- 2019-2020 ARDF Annual Open Grant (US), \$39,980 US, come **co-PI**.
Project: IN SILICO DESIGN OF CUSTOMISED HIGH-AFFINITY ANTIBODY FRAGMENTS
- 2007-2010 Progetto Nazionale di Ricerca CTQ2007-66528/BQU, Ministerio de Educación y Ciencia (Spain) 60500 €, come COLLABORATORE.
Progetto: RELAJACIÓN Y REDISTRIBUCIÓN INTRAMOLECULAR DE ENERGÍA VIBRACIONAL EN MOLÉCULAS CON ENLACES DE TIPO PEPTÍDICO

PRINCIPALI PROGETTI HPC

- OCT 2022 - Progetto IS CRA Class B , come COLLABORATORE
AUG 2023 552000 ore standard in Marconi100, CINECA, Italia.
- OCT 2021 - Progetto IS CRA Class B, come COLLABORATORE
JAN 2023 558000 ore standard in Marconi100, CINECA, Italia.
- JUN 2020 - PRACE COVID-19 Fast Track Call, come **PI**
DEC 2020 416667 ore standard in ARCHER (EPCC, United Kingdom)
- APR 2020 - Progetto IS CRA Class B, come COLLABORATORE
APR 2021 576000 ore standard in Marconi100, CINECA, Italia.
- OCT 2019 - PRACE Tier0 Call 19, come COLLABORATORE
OCT 2020 4925000 ore standard in Galileo & Marconi100, CINECA, Italia.
- AUG 2019 - Progetto IS CRA Class B, come COLLABORATORE
OCT 2020 401342 ore standard in Galileo, CINECA, Italia.
- APR 2019 - Progetto IS CRA Class C, come **PI**
DEC 2020 33600 ore standard in Marconi A2, CINECA, Italia.
- FEB 2018 - Progetto IS CRA Class B, come COLLABORATORE
MAY 2019 640000 ore standard in Marconi A1 & A2, CINECA, Italia.
- MAR 2017 - Progetto PRACE Preparatory Access - cut off 27, come **PI**
SEPT 2017 50000 ore standard in Marconi A1 & A2, CINECA, Italia.
- AUG 2015 - Progetto IS CRA Class C, come COLLABORATORE
JUN 2016 100800 ore standard in Galileo, CINECA, Italia
- JUN 2014 - Progetto IS CRA Class C, come **PI**
MAR 2015 40000 ore standard in Eurora, CINECA, Italia

PUBBLICAZIONI

L'autore corrispondente è indicato come (*)

Sono autore di 39 pubblicazioni indicizzate in riviste internazionali con referee, con la seguente relazione di citazioni:

WOS Citation Metrics: h-index=16, 626 citazioni.

Google Scholar Citation Metrics: h-index=18, 803 citazioni.

La lista completa dei miei articoli si trova sulla mia pagina web:

<https://people.uniud.it/page/miguel.angel.soler.bastida>

Qui di seguito i lavori dal 2019.

1. A. Bastida*, J. Zúñiga, B. Miguel, **M. A. Soler***
Description of conformational ensembles of disordered proteins by residue-local probabilities,
Phys. Chem. Chem. Phys. 25, 10512-10524 (2023)
2. **M. A. Soler**, O. Ozkilinc, Y. Hunashal, P. Giannozzi, G. Esposito, F. Fogolari*
Molecular electrostatics and pKa shifts calculations with the Generalized Born model.
A tutorial through examples with Blues2,
Comput. Phys. Commun. 287, 108716 (2023)
3. **M. A. Soler**, N. Minovski, W. Rocchia, S. Fortuna*
Replica-exchange optimization of antibody fragments,
Comput. Biol. Chem. Volume 103, 107819 (2023)
4. B. Medagli*, **M. A. Soler**, R. De Zorzi, S. Fortuna*
Antibody Affinity Maturation Using Computational Methods: From an Initial Hit to Small-Scale Expression of Optimized Binders. In: K. Tsumoto, D. Kuroda, (eds) Computer-Aided Antibody Design,
Methods Mol. Biol. 2552, 333-359 (2023)
5. E. Calì, S. J. Lin, C. Rocca, Y. Sahin, A. Al Shamsi, S. El Chehadeh, M. Chaabouni, K. Mankad, E. Galanaki, S. Efthymiou, and **others**.
A homozygous MED11 C-terminal variant causes a lethal neurodegenerative disease,
Genet. Med. 24 (10), 2194-2203 (2022).
6. P. B. P. S. Reis, G. P. Barletta, L. Gagliardi, S. Fortuna, **M. A. Soler***, W. Rocchia*
Antibody-Antigen Binding Interface Analysis in the Big Data Era,
Front. Mol. Biosci. 9, 945808 (2022)
7. P. Borgia, S. Baldassari, N. Pedemonte, E. Alkhunaizi, G. D'Onofrio, D. Tortora, E. Calì, P. Scudieri, G. Balagura, I. Musante, and **others**.
Genotype-phenotype correlations and disease mechanisms in PEX13-related Zellweger spectrum disorders,
Orphanet J. Rare Dis. 17(1), 286 (2022)
8. R. Ochoa, **M. A. Soler**, I. Gladich, A. Battisti, N. Minovski, A. Rodriguez, S. Fortuna, P. Cossio, A. Laio
Computational Evolution Protocol for Peptide Design. In: T. Simonson (eds) Computational Peptide Science.
Methods Mol. Biol. 2405, 335-359 (2022)
9. N. Scafuri, **M. A. Soler***, A. Spitaleri and W. Rocchia*
Enhanced Molecular Dynamics Method to Efficiently Increase the Discrimination Capability of Computational Protein-Protein Docking
J. Chem. Theory Comput. 17, 7271-7280 (2021)
10. C. Cantarutti*, M. C. Vargas, C. J. D. Fournthum, M. Dumoulin, S. La Manna, D. Marasco, C. Santambrogio, R. Grandori, G. Scoles, **M. A. Soler**, A. Corazza and S. Fortuna*

Insights on Peptides Topology in the Computational Design of Protein Ligands: The Example of Lysozyme Binding Peptides
Phys. Chem. Chem. Phys. 23, 23158-23172 (2021)

11. **M. A. Soler***, B. Medagli, J. Wang, S. Oloketuyi, G. Bajc, H. Huang, S. Fortuna and A. de Marco*
Effect of Humanizing Mutations on the Stability of the Llama Single-Domain Variable Region
Biomolecules 11 (2), 163 (2021)
12. A. F. Adedeji Olulana*, **M. A. Soler**, M. Lotteri, H. Vondracek, L. Casalis, D. Marasco, M. Castronovo and S. Fortuna*
Computational Evolution of Beta-2-Microglobulin Binding Peptides for Nanopatterned Surface Sensors
Int. J. Mol. Sci. 22, 812 (2021)
13. R. Ochoa, **M. A. Soler**, A. Laio and P. Cossio*
PARCE: Protocol for Amino Acid Refinement through Computational Evolution
Comput. Phys. Commun. 260, 107716 (2021)
14. A. Spitaleri, S. R. Zia, P. Di Micco, B. Al-Lazikani, **M. A. Soler*** and W. Rocchia*
Tuning Local Hydration Enables a Deeper Understanding of Protein–Ligand Binding: The PP1-Src Kinase Case
J. Phys. Chem. Lett. 12, 49–58 (2020)
15. J.-A. Huang*, M. Z. Mousavi, G. Giovannini, Y. Zhao, A. Hubarevich, **M. A. Soler**, W. Rocchia, D. Garoli* and F. De Angelis
Multiplexed Discrimination of Single Amino Acid Residues in Polypeptides in a Single SERS Hot Spot
Angew. Chem. Int. Ed. 59, 11423–11431 (2020)
16. V. Salpietro, C. L. Dixon, H. Guo, O. D. Bello, J. Vandrovcova, S. Efthymiou, R. Maroofian, G. Heimer, L. Burglen, S. Valence and **others**
AMPA Receptor GluA2 Subunit Defects Are a Cause of Neurodevelopmental Disorders
Nat. Commun. 10, 1–16 (2019)
17. **M. A. Soler**, B. Medagli, M. S. Semrau, P. Storici, G. Bajc, A. De Marco, A. Laio* and S. Fortuna*
A Consensus Protocol for the in Silico Optimisation of Antibody Fragments
ChemComm 55, 14043–14046 (2019)

CONTRIBUTI ALLE CONFERENZE

1. Miguel A. Soler.
In silico design of protein binders for medical applications.
Integrative Approaches to Protein Folding & Aggregation.
Presentazione orale.
Lisbona, Portogallo. Giugno 11–12, 2019.
2. Miguel A. Soler, Sara Fortuna, and Alessandro Laio.
In silico design of binders for the molecular recognition of protein targets.
Self-Assembly, Recognition, and Applications (SARA) 2017.
Presentazione orale.
Lincoln, UK. Dicembre 14, 2017.
3. Miguel A. Soler, Sara Fortuna, and Alessandro Laio.
Computational design of binders for protein molecular recognition.
5th Annual CCP-BioSim Conference “Frontiers of Biomolecular Simulation”.
Presentazione orale.
Southampton, UK. Settembre 13–15, 2017.
4. Miguel A. Soler, and Sara Fortuna.
Computational design of nanobodies for the molecular recognition of protein targets.
Self-assembly, Recognition and Applications, Institute of Physics (IOP).
Presentazione orale.
Edinburgh, UK. Dicembre 9, 2016.
5. Miguel A. Soler, Ario de Marco and Sara Fortuna.
Computational design of customised nanobodies for biotechnological applications.
The Physics of Soft and Biological Matter, Institute of Physics (IOP).
Poster.
Cambridge, UK. Aprile 6–8, 2016.
6. Miguel A. Soler, Sara Fortuna and Giacinto Scoles.
Computational design of peptides as probes for the recognition of protein biomarkers.
10th European Biophysics Congress (EBSA).
Poster. Pubblicato in: **M.A. Soler***, S. Fortuna, G. Scoles. Eur Biophys J, 44 (Suppl 1):S149 (2015).
Dresden, Germania. Luglio 18–22, 2015.
7. Miguel A. Soler, Sara Fortuna y Giacinto Scoles.
Computational design of peptides as probes for the recognition of Beta-2-microglobulin.
EMBO Workshop on Advances in protein-protein interaction analysis and modulation.
Poster.
Hyerres, Francia. Settembre 9–12, 2014.
8. Miguel A. Soler and Patricia F.N. Faísca.
Understanding the effects of knots on protein folding properties.
The 27th Annual Symposium of the Protein Society.
Poster. Pubblicato in: **M. A. Soler*** and P.F.N. Faísca*. Protein Science, 22, Issue S1, 96-97 (2013).
Boston, USA. Luglio 20–23, 2013.
9. Miguel A. Soler and Patricia F.N. Faísca.
How difficult is it to fold a knotted protein? The effect of surface tethering.
Workshop of Protein Folding: Integrating theory, simulation and experiment.
Poster.
Zurich, Svizzera. Settembre 3–6, 2012.

COMPETENZE TECNICHE

- Utente avanzato dei sistemi operativi Linux e Windows.
- Conoscenza avanzata della programmazione in Fortran, C++ e Bash Scripting.
- Utente avanzato di Gromacs, HADDOCK, Autodock Vina, FoldX, Pymol, Chimera e VMD.
- Utente avanzato di risorse nazionali/internazionali di calcolo ad alte prestazioni (HPC).