



AL MAGNIFICO RETTORE  
DELL'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MILANO

COD. ID: 4399

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 Chimica

Responsabile scientifico: Sara Sattin

Marco Montefiori

## CURRICULUM VITAE

### INFORMAZIONI PERSONALI

|                 |            |
|-----------------|------------|
| Cognome         | Montefiori |
| Nome            | Marco      |
| Data Di Nascita | 22/08/1987 |

### OCCUPAZIONE ATTUALE

|             |           |
|-------------|-----------|
| Incarico    | Struttura |
| Disoccupato |           |

### ISTRUZIONE E FORMAZIONE

| Titolo                          | Corso di studi          | Università               | anno conseguimento titolo |
|---------------------------------|-------------------------|--------------------------|---------------------------|
| Laurea Magistrale o equivalente | Bioinformatica          | UNIMIB                   | 2013                      |
| Dottorato Di Ricerca            | Pharmaceutical Sciences | University of Copenhagen | 2019                      |

### LINGUE STRANIERE CONOSCIUTE

| lingue   | livello di conoscenza |
|----------|-----------------------|
| Inglese  | Ottimo                |
| Francese | Principiante          |

### PREMI, RICONOSCIMENTI E BORSE DI STUDIO

| anno | Descrizione premio  |
|------|---|
| 2018 | Posizione con Assegno di Ricerca AIRC - Investor Grant 2017 (Durata 12 mesi) presso CNR Milano (laboratorio Professor Colombo Giorgio).   |
| 2014 | Borsa di dottorato (Durata: 36 mesi) Early Stage Researcher (PhD) per Marie Skłodowska Curie Networks for Initial Training, "Analytical Research in ADME Profiling" Acronimo: ARIADME EU Grant Agreement ITN 2013-607517. |
| 2012 | Ottenimento borsa di studio Extra <sup>plus</sup> da Fondazione Cariplo (Durata: 4 mesi) per svolgimento della tesi di Laura Magistrale all'estero.   |



## ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA

|   |
|---|
| <b>Formazione:</b>  |
| 2018-2019: Corsi online "Neural Networks and Deep Learning" (ca. 18 ore), "Structuring Machine Learning Projects" (ca. 7 ore), "Improving Deep Neural Networks: Hyperparameter tuning, Regularization and Optimization" (ca. 18 ore)(deeplearning.ai @ Coursera). Corsi riguardanti la costruzione e il tuning di reti neurali, usando il linguaggio di programmazione Python.  |
| 2015: Corso online "Pharmaceutical Bioinformatics" (7.5 ECTS) (Uppsala University). Corso focalizzato sull'uso delle tecniche di bioinformatica nella ricerca farmacologica.  |
| 2015: Corso online "An Introduction to Interactive Programming in Python" parti 1 (ca. 30 ore) e 2 (ca. 25 ore) (Rice University @ Coursera). Il corso si focalizza sull'uso del linguaggio di programmazione Python  |
| 2015: Corso online "Programming for Everybody (Getting Started with Python)" (ca. 12 ore) (University of Michigan @ Coursera). Corso introduttivo sulla programmazione in Python  |
| <b>Ricerca:</b>   |
| 05/2018-05/2019: Post-Doc presso CNR a Milano. Durante questo progetto è stato studiato l'effetto della mutazione M437K sulla stabilità della proteina NPAC mediante tecniche di dinamica molecolare. La stabilità della proteina è stata studiata con tecniche di dinamica molecolare tradizionali quali RMSD, RMSF, clustering e principal component analysis (PCA), oltre a tecniche più avanzate quali lo studio delle distance fluctuation e della energy decomposition. Durante il progetto sono stati anche creati nuovi script in python che usano tecniche quali la principal component analysis per identificare importanti descrittori nelle simulazioni di dinamica molecolare.   |
| 11/2017-12/2018: Impiego come Teaching and Research Assistent presso University of Copenhagen (Danimarca). L'incarico ha previsto l'insegnamento nel corso "Structural and Computational Medicinal Chemistry", 7.5 ECTS, 27 studenti del primo anno della laurea specialistica, in cui vengono spiegate le basi dello studio computazionale legato al drug design. Sono stati inoltre proposti progetti per i gruppi degli studenti del corso. Oltre a lezioni frontali e di laboratorio computazionale sono stati supervisionati alcuni dei gruppi di studenti ed è stata presa parte alle esaminazioni finali del corso.  |
| 02/2014-08/2018: Dottorato in Pharmaceutical Sciences dal titolo " <i>In Silico Models of Aldehyde Oxidase</i> ". Il progetto si è focalizzato sullo studio computazionale dell'enzima metabolico Aldeide Ossidasi. Mediante l'uso di simulazioni di Quanto-Meccanica (DFT) è stato studiato il meccanismo di reazione dell'enzima, calcolando l'energia di attivazione delle reazioni per diversi substrati. In seguito è stata valutata la precisione di tecniche più semplici per identificare il sito del substrato più reattivo rispetto all'attività enzimatica. Queste conoscenze sono state poi implementate in un webserver per identificare nei vari substrati gli atomi più suscettibili ad una certa attività enzimatica. Durante il progetto sono state anche usate tecniche di dinamica molecolare, docking, induced fit docking, QM-MM, homology modeling. |
| 2018: Studio del trasportatore oligopeptidico Ybgh (progetto condotto all'interno del Dottorato). Mediante l'uso di diverse simulazioni di dinamica molecolare con diversi stati di protonazione sono stati studiati i movimenti e la struttura della proteina, ed è stato validato il meccanismo di azione proposto in letteratura.  |
| 2017-2018: Studio computazionale degli inibitori contro l'enzima Hemagglutinin-Neuramidase del Newcastle disease virus (progetto condotto all'interno del Dottorato). In questo studio sono stati valutati diversi potenziali farmaci inibitori per la proteina. L'affinità tra l'enzima e gli inibitori è stata testata inizialmente a livello computazionale mediante tecniche di docking e induced fit docking. I risultati sono quindi stati validati sperimentalmente da un collaboratore.   |
| 2015: Studio dell'enzima CYP79A1 (progetto condotto all'interno del Dottorato). La struttura dell'enzima è stata ottenuta mediante tecniche avanzate di homology modeling, con l'utilizzo di templates multipli con bassa identità di sequenza. In seguito è stato fatto uno studio di docking per studiare la specificità dell'enzima per il substrato nativo e validare la qualità del modello.   |
| 2012: Tesi di laurea magistrale presso il laboratorio del professor Blumberger (University College of London) dal titolo " <i>Simulation of Gas Diffusion in [FeFe]-Hydrogenases</i> ". Durante questo progetto sono state usate tecniche di dinamica molecolare per studiare i meccanismi di diffusione di gas (quali l'ossigeno) nell'enzima [FeFe]-Idrogenasi, allo scopo di identificare il meccanismo di inibizione.   |
| 2010: Stage presso il laboratorio del prof. De Gioia Luca (Università di Milano Bicocca). L'obiettivo dello stage è stato di studiare le differenze tra un enzima termofilo e uno psicrofilo, mediante tecniche di dinamica molecolare, per comprendere l'adattamento degli enzimi alle basse temperature.  |



## ATTIVITÀ PROGETTUALE

| Anno      | Progetto  |
|-----------|---|
| 2018-2019 | Selezionato come ricercatore Post-Doc per AIRC - Investor Grant 2017  |
| 2014-2018 | Early Stage Researcher in EU Grant Agreement ITN 2013-607517, Marie Skłodowska Curie Networks for Initial Training, "Analytical Research in ADME Profiling" Acronimo: ARIADME |

## CONGRESSI, CONVEGNI E SEMINARI

| Data | Titolo   | Sede                              | Partecipazione |
|------|--|-----------------------------------|----------------|
| 2017 | International Conference on ADME Profiling     | KU Leuven (Be)                    | Poster         |
| 2016 | Knime Workshop                                 | University College of London (UK) | Partecipato    |
| 2016 | UK-Qsar & Chemoinformatics Autumn Meeting 2016 | University College of London (UK) | Partecipato    |
| 2015 | ULLA Summer School                             | Paris Sud University (FR)         | Poster         |

## PUBBLICAZIONI

| Articoli su riviste   |
|---|
| "The impact of mutations on NPAC structural dynamics: mechanistic insights from MD simulations", <i>Journal of Chemical Information and Modeling</i> 2019, 59 (9), pp. 3927-3937, M. Montefiori, S. Pilotto, C. Marabelli, E. Moroni, M. Ferraro, S. A Serapian, A. Mattevi, G. Colombo, Giorgio.   |
| "Fast methods for prediction of aldehyde oxidase-mediated site-of-metabolism", <i>Computational and Structural Biotechnology Journal</i> 2019, 17, pp. 345-351, M. Montefiori, C. Lyngholm-Kjærby, A. Lhong, L. Olsen, F. S. Jørgensen.   |
| "SMARTCYP 3.0: an enhanced software platform for prediction of cytochrome P450 mediated site-of-metabolism", <i>Bioinformatics</i> 2019, 35(17), pp. 3174-3175, L. Olsen, M. Montefiori, K. Phuc Tran and F.S. Jørgensen.   |
| "Molecular Dynamics Simulations Reveal the Proton:Peptide Coupling Mechanism in the Bacterial Proton-Coupled Oligopeptide Transporter YbgH", <i>ACS Omega</i> 2019 4 (1), 2040-2046, A.G. Nanda, M. Montefiori, R. Khalil, M. Gajhede, F.S. Jørgensen, O. Mirza.  |
| "Potent Inhibitors against Newcastle Disease Virus Hemagglutinin-Neuraminidase", <i>ChemMedChem</i> . 13.3 (2018), pp. 236-240, P. Rota, P. La Rocca, M. Piccoli, M. Montefiori, F. Cirillo, L. Olsen, M. Orioli, P. Allevi, and L. Anastasia.  |
| "Synthesis and chemical characterization of several perfluorinated sialic acid glycals and evaluation of their in vitro antiviral activity against Newcastle disease virus", <i>MedChemComm</i> . 8 (2017), pp.1505-13, P. Rota, N. Papini, P. La Rocca, M. Montefiori, F. Cirillo, M. Piccoli, D. Scurati, L. Olsen, P. Allevi and L. Anastasia. |
| "Aldehyde Oxidase: Reaction Mechanism and Prediction of Site of Metabolism", <i>ACS Omega</i> . 2.8 (2017), pp. 4237-44, M. Montefiori, F. S. Jørgensen and L. Olsen.   |
| "The CYP79A1 catalyzed conversion of tyrosine to (E)-p-hydroxyphenylacetaldoxime unravelled using an improved method for homology modeling", <i>Phytochemistry</i> . 135 (2017), pp. 8-17, D. Vazquez-Albacete, M. Montefiori, S. Kol, M.S. Motawia, B.L. Moller, L. Olsen and M.H. Norholm.  |
| "The oxidative inactivation of FeFe hydrogenase reveals the flexibility of the H-cluster", <i>Nat Chem</i> . 6.4 (2014), pp. 336-42, V. Fourmond, C. Greco, K. Sybirna, C. Baffert, P.H. Wang, P. Ezanno, M. Montefiori, M. Bruschi, I. Meynial-Salles, P. Soucaille, J. Blumberger, H. Bottin, L. De Gioia and C. Leger                          |



# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

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.

Luogo e data: SEREGNO, 30/10/2019

FIRMA Marco Montefiori