



AL MAGNIFICO RETTORE
DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

Marco Montefiori
CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

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

OCCUPAZIONE ATTUALE

Incarico	Struttura
Assegnista di Ricerca	Università degli Studi di Milano (Unimi) dipartimento di Chimica

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	2018

LINGUE STRANIERE CONOSCIUTE

lingue	livello di conoscenza
Inglese	Ottimo
Francese	Principiante

PREMI, RICONOSCIMENTI E BORSE DI STUDIO

anno	Descrizione premio
2019	Posizione con Assegno di Ricerca (durata 18 mesi) presso Unimi Milano (laboratorio Prof.ssa Sattin)
2018	Posizione con Assegno di Ricerca AIRC - Investor Grant 2017 (Durata 12 mesi) presso CNR Milano (laboratorio Prof. Colombo)
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 ^{plus} da Fondazione Cariplo (durata 4 mesi) per svolgimento della tesi di Laurea Magistrale all'estero



ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA

Formazione
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
Ricerca
2019-2021: PostDoc presso Unimi (dipartimento di Chimica). Durante questo progetto sono stati progettati e studiati, mediante tecniche di docking, virtual screening e dinamica moleolare, nuovi possibili ligandi con base zuccherinica per le proteine Siglec (Siglec-2, Siglec-7 e Siglec-10). Sono stati inoltre studiati mediante docking e dinamica moleolare nuovi inibitori per le proteine RelP e RelSeq. Infine è stata valutata, mediante tecniche di dinamica moleolare, il meccanismo di regolazione della proteina RelSeq.
2018-2019: 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 moleolare. La stabilità della proteina è stata studiata con tecniche di dinamica moleolare 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 moleolare.
2017-2018: 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.
2014-2018: 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 moleolare, 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 moleolare 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 moleolare 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
2019-2021	Selezionato come ricercatore Post.Doc (Assegnista di ricerca) presso UNIMI
2018-2019	Selezionato come ricercatore Post.Doc (Assegnista di ricerca) presso CNR - Milano 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
2017	International Conference on ADME Profiling	KU Leuven (Be)
2016	Knime Workshop	University College of London (UK)
2016	UK-Qsar & Chemoinformatics Autumn Meeting 2016	University College of London (UK)
2015	ULLA Summer School	Paris Sud University (FR)

PUBBLICAZIONI

Articoli su riviste
"Behaviour of glycolylated sialoglycans in the binding pockets of murine and human CD22." <i>iScience</i> 2021, 24(1) C. Di Carluccio, R. E. Forgione, M. Montefiori, M. Civera, S. Sattin, G. Smaldone, K. Fukase, Y. Manabe, P. R. Crocker, A. Molinaro, R. Marchetti, A. Silipo.
"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”, *Phytochemistry*. 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”, *Nat Chem*. 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

“The impact of mutations on NPAC structural dynamics: mechanistic insights from MD simulations”, *Journal of Chemical Information and Modeling* 2019, 59 (9), pp. 3927-3937, M. Montefiori, S. Pilotto, C. Marabelli, E. Moroni, M. Ferraro, S. A Serapian, A. Mattevi, G. Colombo, Giorgio.

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: CHIASSO, 10/05/2021

FIRMA

Muricio Montefiori