

# Curriculum Vitae

## INFORMAZIONI PERSONALI

**Nome** MARCO  
**Cognome** TUTONE  
**Recapiti** Via Archirafi 28, Dipartimento STEBICEF, 09123896825  
**E-mail** marco.tutone@unipa.it

## FORMAZIONE TITOLI

Laureato in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche il 12/11/2001 con voti 110/110 e la lode.

Ricercatore volontario presso il Dipartimento Farmacochimico Tossicologico e Biologico dell'Università di Palermo da gennaio 2002 ad aprile 2002.

Abilitato alla professione di Farmacista nel dicembre 2002.

Vincitore con borsa di studio del concorso di Dottorato in Scienze Farmaceutiche –XVII ciclo, ottiene il titolo di Dottore di Ricerca il 16/02/2006 con una dissertazione dal titolo "Metodi chemiometrici nello studio degli inibitori di HIV-1: tecniche statistiche multivariate e molecular docking".

Vincitore di un assegno di ricerca cofinanziato dal MIUR presso il Dipartimento Farmacochimico Tossicologico e Biologico dell'Università di Palermo, ricopre la funzione di assegnista di ricerca dal 1 giugno 2005 al 31/10/2008.

E' risultato vincitore della procedura di valutazione comparativa per la copertura di un posto di ricercatore universitario SSD CHIM/08- Chimica Farmaceutica cofinanziato ai sensi del D.M. n. 565 del 14 novembre 2007 e successivo D.M. n. 620 del 30 novembre 2007, presso la Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Palermo.

Ricercatore del SSD CHIM/08-Chimica Farmaceutica presso la Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Palermo dal 1/11/2008 al 31 ottobre 2019.

E' risultato vincitore della procedura di selezione relativa alla copertura di un posto di professore di seconda fascia da ricoprire mediante chiamata presso il Dipartimento STEBICEF - S.C. 03/D1 -S.S.D. CHIM/08

Professore associato del SSD CHIM/08 presso il Dipartimento STEBICEF dal 1 novembre 2019 a tutt'oggi

## ATTIVITA' DIDATTICA

- Ricopre la funzione di Tutor-laureato e responsabile tutoring della Facoltà di Farmacia per conto del C.O.T. dell'Università di Palermo da dicembre 2002 a maggio 2003 con mansioni di: Orientamento e supporto metodologico allo studio; coordinamento delle attività di sportello; organizzatore e relatore di seminari di presentazione della Facoltà di Farmacia presso le scuole superiori.
- Ricopre la funzione di Tutor-laureato e responsabile tutoring della Facoltà di Farmacia per conto del C.O.T. dell'Università di Palermo da novembre 2003 a febbraio 2004 con mansioni di: Orientamento e supporto metodologico allo studio; coordinamento delle attività di sportello; organizzatore e relatore di seminari di presentazione della Facoltà di Farmacia presso le scuole superiori.
- Ricopre la funzione di Tutor-laureato e responsabile tutoring della Facoltà di Farmacia per conto del C.O.T. dell'Università di Palermo da ottobre 2004 a gennaio 2005 con mansioni di: Orientamento e supporto metodologico allo studio; coordinamento delle attività di sportello; organizzatore e relatore di seminari di presentazione della Facoltà di Farmacia presso

le scuole superiori.

- Ricopre la funzione di tutor didattico della Facoltà di Farmacia per conto del C.O.T. dell'Università di Palermo da novembre 2005 a maggio 2006 con mansioni di: Docenza del corso integrativo di Chimica Generale e Inorganica (corso di Laurea in CTF), Supporto teorico e pratico alle esercitazioni di Laboratorio dei corsi di Analisi dei Medicinali (prof. P. Barraja) e Analisi dei Farmaci (prof. P. Diana), orientamento e supporto metodologico allo studio, organizzatore e relatore di seminari di presentazione della Facoltà di Farmacia presso le scuole superiori.
- Ha svolto il ruolo di Docente per il corso propedeutico di Chimica Generale ed Inorganica dei corsi di laurea in CTF e Farmacia per la Facoltà di Farmacia di Palermo dal 18/09/2006 al 29/09/2006.
- Ha svolto il ruolo di Docente per il corso propedeutico di Chimica dei corsi di laurea in Discipline Sanitarie della Facoltà di Medicina e Chirurgia di Palermo dal 25/09/2006 al 6/10/2006.
- E' stato relatore di diverse tesi sperimentali di laurea di studenti del corso di laurea specialistica in C.T.F. e del corso di laurea in Biotecnologie
- Ha guidato numerosi studenti nell'espletamento del lavoro di tesi sperimentale di laurea ed ha fatto parte delle commissioni di esami di laurea per il corso di laurea specialistica in C.T.F.
- Ha svolto cicli di seminari per il corso di insegnamento di Chimica Farmaceutica e Tossicologica III (C.T.F.).
- Ha fatto parte delle commissioni di esami di profitto per i seguenti insegnamenti: Chimica Farmaceutica e Tossicologica III (C.T.F.).
- Attribuzione dell'incarico di insegnamento in "Metodologie Avanzate in Chimica Farmaceutica", 6 CFU Facoltà di Farmacia di Palermo per l'anno accademico 2012-2013
- Attribuzione dell'incarico di insegnamento in "Progettazione dei Farmaci" 6 CFU modulo del corso integrato di "Chimica Farmaceutica Avanzata e Progettazione dei Farmaci" per il corso di laurea in C.T.F. (anni accademici 2013/2014 – 2014-2015 – 2015/2016 – 2016/2017 – 2017/2018 – 2018/2019 – 2019/2020)
- Attribuzione dell'incarico di insegnamento in "Chimica Farmaceutica Avanzata" 6 CFU modulo del corso integrato di "Chimica Farmaceutica Avanzata e Progettazione dei Farmaci" per il corso di laurea in C.T.F. per l'anno accademico 2016/2017
- Attribuzione dell'incarico di insegnamento in "Chimica Farmaceutica Avanzata" 6 CFU modulo del corso integrato di "Chimica Farmaceutica Avanzata e Progettazione dei Farmaci" per il corso di laurea in C.T.F. per l'anno accademico 2017/2018
- Attribuzione dell'incarico di insegnamento in "Chimica Farmaceutica Avanzata e Progettazione dei Farmaci" 12 CFU corso integrato per il corso di laurea in C.T.F. dal 01-10-2017 a oggi (anni accademici 2020/2021 – 2021/2022)
- Docente di riferimento per il Corso di Laurea in C.T.F. dell'Università di Palermo

## **RICERCHE FINANZIATE**

- Partecipazione al progetto di ricerca dal titolo 2005-ATE-0158: SISTEMI ETEROCICLICI DI INTERESSE FARMACEUTICO, ATE - EX60% responsabile prof. Gaetano Dattolo codice ORPA050591 dell'esercizio finanziario dell'anno 2005.
- Partecipazione al Progetto di Ricerca di Interesse Nazionale (PRIN) dell'anno 2004 dal titolo "SISTEMI AZOLICI AD ATTIVITA' ANTINEOPLASTICA". Coordinatore scientifico Prof. Mario Grifantini, responsabile scientifico Prof. Girolamo Cirrincione 2006-NAZ-0038 (prot. 2006030430005)
- Partecipazione al progetto di ricerca dal titolo 2006-ATE-0550: SISTEMI ETEROCICLICI DI INTERESSE FARMACEUTICO, ATE - EX60% responsabile prof. Gaetano Dattolo codice ORPA0688RH dell'esercizio finanziario dell'anno 2006
- Partecipazione al progetto di ricerca del Programma "Futuro in ricerca" RBF087Y6S, coordinato dalla Dott. Ivana Pibiri, con il titolo "Small Molecules design promoting the readthrough of premature stop codons".
- Partecipazione al Progetto di Ricerca di Interesse Nazionale (PRIN) dell'anno 2008 dal titolo "SISTEMI ETEROCICLICI AZOTATI AD ATTIVITA' ANTINEOPLASTICA" (prot. 20082L3NFT001). Coordinatore e responsabile scientifico Prof. Girolamo Cirrincione
- Partecipazione al progetto di ricerca 2012-ATE-0098 dal titolo: Progettazione, sintesi, e studio dell'attività biologica di nuovi inibitori dei processi carcinogenici, responsabile Prof. Antonino Lauria, Collaboratori esterni: Mingoia Francesco (ISMN CNR Palermo), Macario Alberto (School of Medicine, SOM-UMB, and Institute of Marine and Environmental Technology (IMET), University of Maryland at Baltimore (USA).
- Partecipante al progetto CMST COST Action CM1207: GLISTEN: GPCR-Ligand Interactions, Structures, and Transmembrane Signalling: a European Research Network - WG4: Discovery & Design of GPCR Ligands, che ha prodotto le seguenti pubblicazioni su rivista: "Studies on a new potential dopaminergic agent: in vitro BBB permeability, in vivo behavioural effects and molecular docking evaluation " J. Drug Targeting 2015, 10, 910-925; " Design, synthesis and preliminary evaluation of dopamine-amino acid conjugates as potential D1 dopaminergic modulators" Eur. J. Med. Chem. 2016, 124, 435-444.
- Partecipazione al progetto di ricerca FFC#1/2014, finanziato dalla Fondazione Fibrosi Cistica, dal titolo: Identification and validation of novel molecules obtained by integrated computational and experimental approaches for the read-through of PTCs in CF cells. Responsabile Dott. Laura Lentini
- Partecipazione all'attività di ricerca dal titolo "Design, Sintesi e Attività Biologica Di Derivati Eterociclici Ad Attività Antitumorale Su Cellule Di Epatocarcinoma HCC" prevista dal progetto denominato "CIPE 2" finanziato dal MIUR con D.M. 46965 del 31/12/2008 al Consorzio Lato (Laboratorio di Tecnologie Oncologiche HSRGIGLIO).
- **Partecipazione al progetto di ricerca FFC#3/2017 "Optimization of a new lead promoting the readthrough of nonsense mutations for the CFTR rescue in human CF cells", responsabili Dott. Laura Lentini e Dott. Ivana Pibiri**
- **Responsabile scientifico del Finanziamento annuale individuale delle attività base di ricerca (FFABR 2017-Ricercatori), MIUR.**

## INCARICHI / CONSULENZE

- Review editor per la rivista *Frontiers in Chemistry: Medicinal and Pharmaceutical Chemistry* dal 04-10-2016 a oggi
- Editorial board member per la rivista *Current Drug Discovery Technologies* dal 08-01-2018
- Editorial board member per la rivista *The Open Bioinformatics Journal* dal 15-12-2017
- Advisory board member per la rivista *The Open Enzyme Inhibition Journal* dal 7-12-2017
- Responsabile dei siti web dei corsi di Laurea in Farmacia e CTF del dipartimento STEBICEF, Scuola delle Scienze di Base ed Applicate
- Commissario del Rapporto di Riesame per il cds in CTF
- Reviewer per il National Science Centre (Narodowe Centrum Nauki - NCN), Polonia per il progetto Funding scheme SONATA, Development of an NK1 receptor homology model based on the data concerning interspecies differences in ligand binding., Dr Piotr Jakub Lipski, Mossakowski Medical Research Centre Polish Academy of Sciences, No. 357833, Panel NZ7. dr Antonina Chmura-Skirli ska Koordynator Dyscyplin, Nauki o yciu dal 12-04-2017 al 22-04-2017
- Reviewer per la Czech Science Foundation del progetto 18-27109S - Drug design and identification of possible miRNA targets on the cancer cells by computer modelling dal 11-06-2017 al 31-07-2017
- Partecipante al Progetto "Mentore per la Didattica" del Presidio di Qualità dell'Università di Palermo dal 1 ottobre 2016 al 30 settembre 2017
- Membro della commissione di Riesame Annuale e Ciclico per il 2016 del Corso di Studio di Chimica e Tecnologia Farmaceutiche
- Membro della Commissione Assicurazione di Qualità del Corso di Laurea Magistrale in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche dal 03-03-2016 a oggi
- Docente Referente per il corso di Progettazione dei Farmaci per la visita didattica presso il BSC (Barcelona SuperComputing Center), Barcelona, Spagna dal 11-05-2015 al 15-05-2015
- Reviewer per le riviste ISI/Scopus: *Frontiers in Chemistry: Medicinal and Pharmaceutical Chemistry*, *European Journal of Medicinal Chemistry*, *Current Pharmaceutical Analysis*, *Letters in Drug Design & Discovery*, *Chemical Biology & Drug Design*, *Interdisciplinary Sciences: Computational Life Sciences*, *Computational Biology and Chemistry*, *Chemical Data Collections*, *Current Drug Discovery Technologies*, *International Journal of Molecular Sciences*, *ACS Medicinal Chemistry Letters*, *Computational Biology and Chemistry*, *International Journal of Molecular Sciences*, *Scientific Reports*

## PUBBLICAZIONE

1. Almerico, A.M.; Lauria, A.; **Tutone, M.**; Diana, P.; Barraja, P.; Montalbano, A.; Cirrincione, G.; Dattolo, G. "A multivariate analysis on non-nucleoside HIV-1 reverse transcriptase inhibitors and resistance induced by mutation" *QSAR & Comb. Sci.* 2003, 22, 984-996
2. Almerico, A.M.; Lauria, A.; **Tutone, M.**; Diana, P.; Barraja, P.; Montalbano, A.; Cirrincione, G.; Dattolo, G. "A multivariate analysis on HIV-1 protease inhibitors and resistance induced by mutation" *J. Chem. Inf. & Mod.*, 2006, 46, 168-179
3. Almerico, A.M.; **Tutone, M.**; Ippolito, M.; Lauria, A. "Molecular Modelling and QSAR in the Discovery of HIV-1 Integrase Inhibitors" *Current Computer Aided Drug Design*, 2007, 3, 214-233
4. Almerico A.M., **Tutone M.**, Lauria A., "Docking and multivariate methods to explore HIV-1 drug-resistance: a comparative analysis", *J. Comput. Aided Mol. Des.*, 2008, 22, 5, 287-297.
5. Almerico A.M., **Tutone M.**, Lauria A., "In-silico screening of new potential Bcl-2/Bcl-xl inhibitors as apoptosis modulators", 2009, *J. Mol. Mod.*, 2009, 15 4,349-355.
6. Almerico A.M., **Tutone M.**, Lauria A., "A QSAR study investigating the potential anti-HIV-1 effect of some Acyclovir and Ganciclovir analogs", *ARKIVOC*, 2009, viii, 85-94.
7. Lauria A., **Tutone M.**, Almerico A.M., "Design of new DNA-interactive agents by molecular docking and QSPR approach", *ARKIVOC*, 2010, XI, 13-27.
8. Lauria A., **Tutone M.**, Ippolito M., Pantano L., Almerico, A.M. "Molecular Modeling Approaches in the Discovery of New Drugs for Anti-Cancer Therapy: The Investigation of p53-MDM2 Interaction and its Inhibition by Small Molecules", *Curr. Med. Chem.*, 2010, 17, 3142-3154.
  
- 9 Almerico A.M., **Tutone M.**, Lauria A., "3D-QSAR Pharmacophore Modeling and in Silico Screening of new Bcl-xl Inhibitors", *Eur. J. Med. Chem.*, 2010, 45, 4774-4782.
  
- 10 Lauria A., Ippolito M., Fazzari M., **Tutone M.**, Di Blasi F., Mingoa F., Almerico A.M., "IKK-beta inhibitors: An analysis of drug-receptor interaction by using Molecular Docking and Pharmacophore 3D-QSAR approaches", *J. Mol. Graph. Mod.*, 2010, 29, 72-81.
  
- 11 Lauria A., **Tutone M.**, Almerico A.M., "Virtual lock-and-key approach: The in silico revival of Fischer model by means of molecular descriptors", *Eur. J. Med. Chem.*, 2011, 46, 4274-4280.

12. Almerico A.M., **Tutone M.**, Lauria A., "Receptor-guided 3D-QSAR approach for the discovery of c-kit tyrosine kinase inhibitors", *J. Mol. Mod.*, 2012, 18, 2885-2895.
- 13 Almerico A.M., **Tutone M.**, Guarcello A., Lauria A., "In vitro and in silico studies of polycondensed diazine systems as anti-parasitic agents", *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 2012, 22, 1000-1004.
- 14 Almerico A.M., **Tutone M.**, Pantano L., Lauria A., "Molecular dynamics studies on Mdm2 complexes: An analysis of the inhibitor influence", *Biochem. Biophys. Res. Comm.*, 2012, 424, 341-347.
- 15 Almerico A.M., **Tutone M.**, Pantano L., Lauria A., "A3 adenosine receptor: Homology modeling and 3D-QSAR studies" *J. Mol. Graph. and Model.* 2013, 42, 60-72
- 16 Lauria A., **Tutone M.**, Barone G., Almerico A.M. Multivariate analysis in the identification of biological targets for designed molecular structures: The BIOTA protocol. *Eur. J. Med. Chem.*, 2014, 75, 106-110
- 17 Lauria A., Terenzi A., Bartolotta R., Bonsignore R., Perricone U., **Tutone M.**, Martorana A., Barone G., Almerico A.M.. Does ligand symmetry play a role in the stabilization of DNA g-quadruplex host-guest complexes? *Curr. Med. Chem.*, 2014, 21, 2665-2690.
- 18 **Tutone M.**, Lauria A., Almerico A.M.. Leptin and the ob-receptor as anti-obesity target: recent in silico advances in the comprehension of the protein-protein interaction and rational drug design of anti-obesity lead compounds. *Curr. Pharm. Des.*, 2014, 20, 136-145
- 19 **Tutone M.**, Pantano L., Lauria A., Almerico A.M.. Molecular dynamics, dynamic site mapping, and highthroughput virtual screening on leptin and the Ob receptor as anti-obesity target. *J. Mol. Model.*, 2014, 20, 1-10.
- 20 Tesoriere L., Gentile C., Angileri F., Attanzio A., **Tutone M.**, Allegra M., Livrea M.A.. Trans-epithelial transport of the betalain pigments indicaxanthin and betanin across Caco-2 cell monolayers and influence of food matrix. *Eur J. Nutr.*, 2014, 52, 1077-1087.
- 21 **Tutone M.**, Lauria A., Almerico A.M. Theoretical Determination of the pK<sub>a</sub> Values of Betalamic Acid Related to the Free Radical Scavenger Capacity: Comparison Between Empirical and Quantum Chemical Methods. *Interdis. Sci.: Comp. Life Sci.*, 2016, 8, 177-185
- 22 Naselli F., Belshaw N., Gentile C., **Tutone M.**, Tesoriere L., Livrea M., Caradonna F.. Phytochemical Indicaxanthin Inhibits Colon Cancer Cell Growth and Affects the DNA Methylation Status by Influencing Epigenetically Modifying Enzyme Expression and Activity. *J. Nutrigen. Nutrigenomics*, 2015, 8, 114-127
- 23 Allegra M., Carletti F., Gambino G., **Tutone M.**, Attanzio A., Tesoriere L., Ferraro G., Sardo P., Almerico A., Livrea M.. Indicaxanthin from *Opuntia ficus-indica* Crosses the Blood Brain Barrier and Modulates Neuronal Bioelectric Activity in Rat Hippocampus at Dietary-Consistent Amounts. *J. Agr. And Food Chem.*, 2015, 63, 7353-7360.
- 24 De Caro V., Suter F.M., Gentile C., **Tutone M.**, Livrea M.A., Almerico A.M., Cannizzaro C., Giannola L.I.. Studies on a new potential dopaminergic agent: in vitro BBB permeability, in vivo behavioural effects and molecular docking evaluation. *J. DRUG TARGET.*, 2015, 23, 910-925.
- 25 Pibiri I., Lentini L., **Tutone M.**, Melfi R., Pace A., Di Leonardo A.. Exploring the readthrough of nonsense mutations by non-acidic Ataluren analogues selected by ligand-based virtual screening. *Eur. J. Med. Chem.*, 201, 122, 429-435
- 26 **Tutone M.**, Chinnici A., Almerico A., Perricone U., Suter F., De Caro V.. Design, synthesis and preliminary evaluation of dopamine-amino acid conjugates as potential D1 dopaminergic modulators. *Eur. J. Med. Chem.*, 2016, 124,

435-444.

27 Indelicato S., Bongiorno D., Calabrese V., Perricone U., Almerico A., Ceraulo L., Piazzese D., **Tutone M.** Micelles, Rods, Liposomes, and Other Supramolecular Surfactant Aggregates: Computational Approaches. *Interdis. Sci.: Comp. Life Sci.*, 2017, 9, 392-405.

28 Bongiorno D., Indelicato S., Ceraulo L., Perricone U., Calabrese V., Almerico A., Liveri V., **Tutone M.** Micelles of the chiral biocompatible surfactant (1R,2S)-dodecyl-(2-hydroxy-1-methyl-2-phenylethyl)dimethylammonium bromide (DMEB): Molecular dynamics and fragmentation patterns in the gas phase. *Rapid Comm. Mass Spectr.*, 2017, 31, 1158-1168.

29 Perricone U., Wieder M., Seidel T., Langer T., Padova A., Almerico A., **Tutone M.** A Molecular Dynamics-Shared Pharmacophore Approach to Boost Early-Enrichment Virtual Screening: A Case Study on Peroxisome Proliferator-Activated Receptor. *CHEMMEDCHEM*, 2017, 1399-1407.

30 **Tutone M.**, Almerico A.M. Recent advances on CDK inhibitors: An insight by means of in silico methods. *Eur J. Med. Chem.*, 2017, 142, 300-315

31 **Tutone M.**, Perricone U., Almerico A.M. Conf-VLKA: A structure-based revisit of the Virtual Lock-and-key Approach. *J. Mol. Graph. & Model.*, 2017, 71, 50-57.

32 **Tutone M.**, Virzi A., Almerico A.M. Reverse screening on indicaxanthin from *Opuntia ficus-indica* as natural chemoactive and chemopreventive agent. *J. Theor. Biol.*, 2018, 455, 147-160

33 Pibiri I., Lentini L., Melfi R., **Tutone M.**, Baldassano S., Ricco Galluzzo P., Di Leonardo A., Pace A. Rescuing the CFTR protein function: Introducing 1,3,4-oxadiazoles as translational readthrough inducing drugs. *Eur. J. Med. Chem.*, 2018, 159, 126-142

**34 Tutone M., Pecoraro B., Almerico A.M. Investigation on Quantitative Structure-Activity Relationships of 1,3,4-Oxadiazole Derivatives as Potential Telomerase Inhibitors. Curr. Drug Disc. Tech., 2019, DOI [10.2174/1570163815666180724113208](https://doi.org/10.2174/1570163815666180724113208)**

35 Pecoraro B., **Tutone M.**, Hoffman E., Hutter V., Almerico A.M., Traynor M. Predicting Skin Permeability by means of Computational Approaches: Reliability and Caveats in Pharmaceutical Studies. *J. Chem. Inf. Model.* **Just Accepted Manuscript** DOI: 10.1021/acs.jcim.8b00934

Comunicazioni a congresso

1. Almerico, A.M., Lauria, A., **Tutone, M.**, Diana, P., Barraja, P., Montalbano, A., Cirrincione, G., Dattolo, G. "A multivariate analysis on non-nucleoside HIV-1 reverse transcriptase inhibitors and resistance induced by mutation" Mediterranean Seminar on Computational Chemistry for Complex Systems, Palermo, ottobre 2002

2. **Tutone, M.**, Lauria, A., Diana, P., Barraja, P., Montalbano, A., Cirrincione, G., Dattolo, G., Almerico, A.M. "Analisi multivariata dell'attività anti-HIV di analoghi del ganciclovir ed aciclovir" Convegno Regionale SCI Sicilia, Palermo, dicembre 2003

3. **Tutone M.** "Tecniche chemiometriche e di molecular modelling applicate all'analisi di Farmaci anti-HIV-1" Pharm&Chem I meeting di dottorandi, Palermo, giugno 2004
4. Almerico, A.M., Lauria, A., **Tutone, M.**, Diana, P., Barraja, P., Montalbano, A., Cirrincione, G., Dattolo, G. "A multivariate analysis on HIV-1 protease inhibitors and resistance induced by mutation" The 15th Symposium on Quantitative Structure Activity & Molecular Modelling, Istanbul, settembre 2004
5. **Tutone M.** "Farmaci anti-HIV-1. Correlazioni tra analisi statistica multivariata e docking molecolare" Pharm&Chem&Tech meeting di dottorandi, Palermo, giugno 2005
6. **Tutone M.** "QSAR and molecular docking techniques in the study of HIV-1 inhibitors" ESMEC - European School of Medicinal Chemistry - Urbino. XXV Advanced Course of Medicinal Chemistry and "E.Duranti" National Seminar for PhD Students, Urbino, luglio 2005
7. Almerico, A.M., Lauria, A., **Tutone, M.**, Diana, P., Barraja, P., Montalbano, A., Cirrincione, G., Dattolo, G. "HIV-1 protease inhibitors and resistance induced by mutation. Correlation between multivariate analysis and molecular docking" 20th International Congress Heterocyclic Chemistry, Palermo, 31 Luglio-5 Agosto 2005
8. **Tutone, M.**, Lauria, A., Almerico, A. M. "Analisi multivariata e docking nello studio degli inibitori di HIV-1 integrasi" SCI Convegno Congiunto delle Sezioni Calabria e Sicilia, Catania, dicembre 2005
9. **Tutone M.**, Lauria A., Almerico A.M. "Bcl-2 come target di farmaci antitumorali modulatori dell'apoptosi" XVIII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, Chieti, settembre 2007
10. Almerico A.M., **Tutone M.**, Barraja P., Diana P., Cirrincione G., Lauria A., "Study on the mechanism of action of antitumor photochemotherapeutic agents by means of docking and QSPR analysis", XIX National Meeting on Medicinal Chemistry, Verona, settembre 2008.
11. Almerico A.M., **Tutone M.**, Lauria A., "Molecular dynamics and docking in the study of new inhibitors of MDM2-p53 interaction", The 17th European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationships & Omics, Uppsala, settembre 2008.
12. Almerico A.M., **Tutone M.**, Lauria A., "Pharmacophore modeling e screening in silico di nuovi inibitori della proteina antiapoptotica BCL-XL", IV Convegno Congiunto Sicilia-Calabria della Società Chimica Italiana, Arcavacata di Rende, dicembre 2008.
13. **Tutone M.**, Almerico A.M., Lauria A., "Computational methodologies in the discovery of inhibitors of HIV-1", Nuove Prospettive in Chimica Farmaceutica, III meeting", Pisa, febbraio 2009.
14. Lauria A., Ippolito M., **Tutone M.**, Mingoia F., Almerico A.M., "Molecular modeling and dynamics of the transcription factor Nf-kb complexed with Ikb", XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Sorrento, luglio 2009.
15. Lauria A., **Tutone M.**, Almerico A.M., "Virtual lock and key approach: the revival of Fischer model", XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Sorrento, luglio 2009.
16. Pantano L., **Tutone M.**, Lauria A., Almerico A.M. "Studi di Dinamica Molecolare su Mdm2 legata a due differenti inibitori", Convegno Congiunto delle Sezioni Calabria e Sicilia, Acicastello, dicembre 2009.
17. Almerico A.M., **Tutone M.**, Lauria A., "Inside c-kit tyrosine kinase: molecular modeling and QSAR in the search of new inhibitors", IV NPCF Nuove Prospettive in Chimica Farmaceutica, Cagliari, aprile 2010.

18. Lauria A., Pantano L., **Tutone M.**, Almerico A.M., "The discovery of new inhibitors of Hif-1 transcriptional activity by virtual screening", XX National Meeting on Medicinal Chemistry, Abano Terme, settembre 2010.
19. Lauria A., **Tutone M.**, Almerico A.M., "The purposing of new compounds or the re-purposing of old drugs by means of multivariate analysis on molecular descriptors", 18<sup>th</sup> EuroQSAR, Rhodes, settembre 2010.
20. Lauria A., Pantano L., **Tutone M.**, Almerico, A.M., "The discovery of new Hif-1 inhibitors through molecular modeling studies" 18<sup>th</sup> EuroQSAR, Rhodes, settembre 2010.
21. Lauria A., Pantano L., **Tutone M.**, Almerico A.M., "Tecniche di modellistica molecolare nella progettazione di inibitori dell'attività trascrizionale di Hif-1", Convegno Congiunto delle Sezioni Calabria e Sicilia, Palermo, dicembre 2010.
22. Almerico A.M., **Tutone M.**, Pantano L., Lauria A., "A3 Adenosine Receptor: Homology Modeling and 3D-Qsar Studies", XXIV Congresso Nazionale Della Società Chimica Italiana, Lecce, settembre 2011.
23. **Tutone M.**, Lauria A., Guarcello A., Mingoia F., Almerico A.M., "*In vitro* and *in silico* studies of polycondensed diazine systems as anti-infective agents", XXIV Congresso Nazionale Della Società Chimica Italiana, Lecce, settembre 2011.
24. **Tutone M.**, Lauria A., Almerico A.M., "Studio del ruolo delle mutazioni "gatekeeper" V654A e T670I di c-kit kinase nell'interazione con inibitori attraverso un approccio misto Dinamica Molecolare/Docking", Convegno Congiunto delle Sezioni Calabria e Sicilia SCI, Messina, 1-2 dicembre 2011
25. **Tutone M.**, Pantano L., Lauria A., Martorana A., Almerico A.M., "Pharmacophore modelling as useful tool in the lead compounds identification and optimization", Congresso STEMPIO 2012, Palermo.
26. **Tutone M.**, Pantano L., Marino G., Lauria A., Almerico A.M., "Molecular modelling on Leptin and the Ob receptor as anti-obesity target", XXI National Meeting on Medicinal Chemistry, Palermo, 17-20 luglio 2012
27. **Tutone M.**, Pantano L., Marino G., Lauria A., Almerico A.M., "In the search of Leptin agonists as anti-obesity drugs: protein/protein docking, molecular dynamics, and virtual screening, EUROQSAR 2012, Vienna, 26-30 agosto 2012
28. Almerico A.M., **Tutone M.**, Lauria A., "THEORETICAL DETERMINATION OF THE pK<sub>as</sub> OF BETALAMIC ACID RELATED TO THE FREE-RADICAL SCAVENGER CAPACITY: COMPARISON BETWEEN SEMI-EMPIRICAL AND *AB INITIO* METHODS" XXII National Meeting on Medicinal Chemistry, Roma, settembre 2013
29. **Tutone M.**, Almerico A.M., Lauria A., Suter F.M., Cannizzaro C., Giannola L.I., Decaro V., "DA-Phen, a new dopamine amino acid conjugate: *in vivo* testing and molecular modeling as dopaminergic modulator" XXV Congresso Nazionale Della Società Chimica Italiana, Arcavacata di Rende, settembre 2014.
30. **Tutone M.**, Pantano L., Lauria A., Ferrantelli V., Macaluso A., Lo Cascio G., Almerico A.M. "Evaluation of matrix effect on the GC/MS response of eighteen pesticides by multivariate approach" XXIII NMMC & 9<sup>th</sup> NPCF - September 6-9 2015, Salerno (Italy)

#### ATTIVITA' SCIENTIFICHE

- Vincitore di una borsa di studio come Relatore invitato al convegno NUOVE PROSPETTIVE IN CHIMICA FARMACEUTICA -III MEETING-WORKSHOP, IL CIOCCO, CASTELVECCHIO PASCOLI (LU), 13-14 FEBBRAIO 2009, con comunicazione orale dal titolo: "Computational methodologies in the discovery of inhibitors of HIV-1." dal 13-02-2009 al 14-02-2009



- Vincitore di una borsa di studio come Relatore invitato al convegno IV NPCF NUOVE PROSPETTIVE IN CHIMICA FARMACEUTICA, PULA, CG, 6-7 MAGGIO 2010, con comunicazione orale dal titolo: "Inside c-kit tyrosine kinase: molecular modeling and QSAR in the search of new inhibitors." dal 06-05-2010 al 07-05-2010
- Borsa di studio su invito per il Workshop GLISTEN GPCR-Ligand Interactions, Structures, and Transmembrane Signalling: a European Research Network Work group meeting and Workshop October 7-9, 2013, Warsaw, Poland Biological and Chemical Research Centre dal 07-10-2013 al 09-10-2013

## **AMBITI DI RICERCA**

L'attività scientifica del Prof. Marco Tutone è orientata essenzialmente agli studi ed alle applicazioni dei metodi di modellistica molecolare nell'ambito della Chimica Farmaceutica. In particolare si è interessato di Homology Modelling, Dinamica Molecolare, 3D-QSAR, pharmacophore modelling, docking molecolare, virtual screening, *in silico* drug design ed analisi QSPR/QSAR di classi di farmaci ad attività antivirale, antitumorale, antiprotozoaria con l'intento di elucidarne i meccanismi di azione e di fornire utili linee guida per l'identificazione di nuovi hit e lead compounds. La sua attività, negli ultimi anni, è stata orientata inoltre allo studio di sostanze di origine naturale quali le Betalaine nel tentativo di comprenderne al meglio le caratteristiche chimico-fisiche ed i meccanismi di azione a livello fisiologico. L'attività scientifica del Prof. Tutone è anche orientata alla progettazione, sintesi e valutazione biologica di molecole attive a livello del sistema nervoso centrale in particolar modo modulatori della trasmissione dopaminergica. Dal 2014 è attivamente impegnato in progetti finanziati (FFC#1/2014 e FFC#3/2017) dalla Fondazione per la Fibrosi Cistica (FFC) per il l'identificazione e ottimizzazione di nuove molecole ottenute mediante approcci integrati computazionali e sperimentali per il read-through di codoni di stop prematuri in cellule CF. Tali progetti hanno prodotto il deposito di un brevetto internazionale "Oxadiazole derivatives for the treatment of genetic diseases due to nonsense mutations"

## **ALTRE ATTIVITA**

E' possessore di un brevetto internazionale PCT WO 2019/101709 A1 dal titolo "Oxadiazole derivative for the treatment of genetic diseases due to nonsense mutations"