
Dati personali

Nome:	Domenico
Cognome:	Marson
Data di nascita:	21 aprile 1987
Luogo di nascita:	Vittorio Veneto (TV), Italia
Nazionalità:	Italiana
h-index	10 (fonte <i>Scopus</i>)
Citazioni	410 totali, da 335 documenti (fonte <i>Scopus</i> , aggiornato 07 agosto 2020)

Esperienza professionale

Settembre 2019 – oggi

Titolare di un assegno per la collaborazione ad attività di ricerca per il settore scientifico-disciplinare ING-IND/24 – Principi di Ingegneria Chimica presso il laboratorio MolBNL del Dipartimento di Ingegneria e Architettura (DIA) dell'Università degli Studi di Trieste, Italia. Argomento della ricerca: *“Applicazione e sviluppo di tecniche avanzate di simulazione molecolare per approcci teranostici innovativi in nanomedicina”*.

Ottobre 2015 – Settembre 2019

Titolare di un assegno per la collaborazione ad attività di ricerca per il settore scientifico-disciplinare ING-IND/24 – Principi di Ingegneria Chimica presso il Dipartimento di Ingegneria e Architettura (DIA) dell'Università degli Studi di Trieste, Italia. Argomento della ricerca: *“Sviluppo e applicazione di tecniche computazionali multiscala per la modellazione di materiali nanostrutturali complessi”*, bando SIR (Scientific Independence of young Researchers) Structure and FunctiOn at the Nanoparticle bioInterfAce – SinFONIA – codice proposta RBSI14PBC6.

Gennaio 2012 – oggi

Attività di ricerca nel campo delle scienze della vita e dello sviluppo di materiali innovativi presso il laboratorio MOSE, ora MolBNL, del Dipartimento di Ingegneria e Architettura (DIA) dell'Università degli Studi di Trieste, Italia. L'attività di ricerca ha coinvolto diversi aspetti della nanomedicina e dello studio delle proprietà di materiali innovativi, come si può evidenziare dalle diverse collaborazioni del gruppo (*vide infra*). Il mio ruolo è stato focalizzato sull'utilizzo e sviluppo di tecniche computazionali, mediante l'utilizzo di centri HPC (*high performing computing*) ed *in-house* cluster ibridi CPU/GPU. Inoltre ho collaborato nella parte sperimentale in alcuni progetti.

Formazione

Gennaio 2012 – Dicembre 2014

Dottorato di ricerca in Nanotecnologie presso l'Università degli Studi di Trieste, con tesi dal titolo *“Accoppiamento di approcci computazionali e sperimentali per lo sviluppo di nuovi trasportatori dendrimerici per la terapia genica”*, supervisore prof.^{ssa} Sabrina Pricl, SSD: ING-IND/24.

Novembre 2011

Abilitazione alla professione di Farmacista presso l'Università degli Studi di Trieste.

Settembre 2006 – Luglio 2011

Laurea magistrale in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Trieste, con tesi dal titolo *“Indagine sul sito di legame del recettore sigma-1: utilizzo di tecniche di modellazione molecolare nello studio dei meccanismi d'interazione ligando recettore con due nuove serie di composti”*. Relatore prof.^{ssa} Maria Grazia Mamolo; correlatori Prof.^{ssa} Sabrina Pricl e dott. Erik Laurini. Valutazione: 110/110 e lode.

Competenze personali

Conoscenze linguistiche:	Italiano madrelingua. Conoscenza buona dell'inglese scritto e parlato. Conoscenza scolastica del francese scritto e parlato.
Competenze informatiche:	Conoscenza molto buona degli applicativi Microsoft. Conoscenza discreta dell'utilizzo dei programmi Adobe Photoshop, Illustrator e Premiere. Conoscenza molto buona dei linguaggi di programmazione/scripting Python (v>2.7 e v>3.6) e Bash. Conoscenza discreta del linguaggio L ^A T _E X. Ottima conoscenza degli ambienti Windows, Linux (CLI-GUI) e MacOS (CLI-GUI).
Competenze tecnico-informatiche:	Conoscenza ottima dei software per la simulazione molecolare - BIOVIA Discovery Studio e Material Studio - AMBER - GROMACS (in particolare implementazione del forcefield MARTINI e integrazione con il plug-in PLUMED) - LAMMPS (in particolare simulazioni DPD e studio di proprietà meccaniche di nanomateriali a livello atomistico) Conoscenza discreta dell'ambiente MATLAB. Conoscenza discreta del software GAMESS. Abilità ottima nello scripting in Bash e Python, specialmente per quanto riguarda l'analisi di dati ed il calcolo in ambiente GPU e CPU in parallelo. Conoscenza ottima dei software di visualizzazione molecolare e analisi di traiettoria CHIMERA e VMD.
Competenze tecnico-sperimentali:	Conoscenza buona degli strumenti ITC (Isothermal Titration Calorimetry), DLS (Dynamic Light Scattering) e CD (Circular Dichroism).

Attività ed incarichi didattici

A.A. 2019-2020

Docente a contratto per l'A.A. 2019/2020 del corso di Termodinamica (settore ING-IND/24, CFU 9) per i Corsi di Laurea Triennale in Ingegneria Industriale dell'Università degli Studi di Trieste.

Dall' A.A. 2012-2013 ad oggi

Attività didattica integrativa e di supporto per il corso di insegnamento in “Simulazione Molecolare” del Master in Ingegneria Clinica – Clinical Engineering (MIC-MCE) presso l'Università degli Studi di Trieste.

Dall' A.A. 2012-2013 ad oggi

Attività didattica integrativa e di supporto per il corso di insegnamento in “Simulazione Molecolare” del C.d.L. Magistrale in Ingegneria di Processo e dei Materiali e per il C.d.L. Magistrale di Ingegneria Clinica (curriculum: Biomedica) presso l'Università degli Studi di Trieste.

Dall' A.A. 2012-2013 all'A.A. 2017-2018

Attività didattica integrativa e di supporto per il corso di insegnamento in “Tecniche di Simulazione Molecolare per le Scienze Farmaceutiche” del C.d.L. Magistrale in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Trieste.

Supervisione di studenti di laurea triennale/magistrale

Dal 2013 ad oggi:

Correlatore di 3 studenti laureandi triennali e magistrali in:

- C.d.L. magistrale in “Ingegneria di Processo e dei Materiali”, Dipartimento di Ingegneria e Architettura (DIA) dell'Università degli Studi di Trieste
- C.d.L. magistrale in “Chimica e Tecnologie Farmaceutiche”, Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche dell'Università degli Studi di Trieste

Relatore di 4 studenti laureandi triennali in:

- C.d.L. triennale in “Ingegneria Industriale”, Dipartimento di Ingegneria e Architettura (DIA) dell'Università degli Studi di Trieste

Direzione o partecipazione alle attività di gruppi di ricerca caratterizzati da collaborazioni nazionali ed internazionali

- Gruppo di ricerca: Prof. Ling Peng, CNRS director, Centre Interdisciplinaire de Nanoscience de Marseille, Aix-Marseille Université, Marseille (France). Tematica di ricerca 1: progettazione, sintesi, caratterizzazione e test in vitro ed in vivo di nanovettori per il trasporto ed il rilascio controllato di farmaci e materiale genetico in oncologia. Attività di ricerca: nell'ambito di questa ricerca il dottor Marson ha condotto attività di ricerca sia di modellazione molecolare multiscala riguardante gli aspetti di progettazione dei nanosistemi a livello molecolare e sovramolecolare che di termodinamica di interazione tra tali nanovettori ed i loro target biologici. Tematica di ricerca 2: caratterizzazione sperimentale delle proprietà chimico-fisiche e termodinamiche di molecole organiche e loro sistemi complessi. Attività di ricerca: il dottor Marson ha condotto attività di ricerca sperimentale e di modellazione molecolare riguardante la descrizione e la

quantificazione energetica e termodinamica delle interazioni intra- ed inter-molecolari dei vari sistemi oggetti di studio. Periodo: da Gennaio 2013 ad oggi.

- Gruppo di ricerca: Prof. Bernhard Wuensch, Institute of Pharmaceutical and Medicinal Chemistry, University of Muenster, Muenster (Germania). Tematica di ricerca: progettazione, sintesi, relazioni quantitative struttura-proprietà (QSPR) e struttura-attività (QSAR) ed aspetti termodinamici dell'interazione di nuove entità chimiche come ligandi del recettore transmembrana σ_1 . Attività di ricerca: il dottor Marson ha condotto attività di ricerca nella progettazione assistita al computer, sviluppo di modelli QSPR e QSAR e stima della affinità e della stabilità termodinamica dei complessi ligando/proteina. Periodo: da Maggio 2012 ad oggi.
- Gruppo di ricerca: Dott.ssa Silvana Pilotti, Laboratorio di Patologia Molecolare, Dipartimento di patologia, Fondazione IRCCS Istituto Nazionale dei Tumori, Milano, Italia. Tematica di ricerca: caratterizzazione mediante approccio combinato computazionale/sperimentale di forme mutate di proteine di interesse oncologico, della loro interazione strutturale e termodinamica con gli specifici inibitori, e dei meccanismi di resistenza in terapia oncologica. Attività di ricerca: il dottor Marson ha condotto attività di ricerca nella caratterizzazione computazionale della termodinamica e cinetica di legame di forme mutate di proteine di interesse oncologico con loro specifici inibitori. Periodo: da Gennaio 2014 ad oggi.
- Gruppo di ricerca: Prof. Kostas Kostarelos, Nanomedicine Lab, Faculty Biology, Medicine and Health, The University of Manchester, Manchester, UK and National Graphene Institute, The University of Manchester, Manchester, UK. Tematica di ricerca: approccio combinato di tecniche computazionali e sperimentali per lo studio e caratterizzazioni delle interazioni strutturali e chimico fisiche tra acidi nucleici o piccoli peptidi e fogli di grafene. Attività di ricerca: nell'ambito di questa ricerca il dottor Marson ha sviluppato un nuovo modello per lo studio computazionale di fogli di grafene, usandolo per la caratterizzazione dell'interazione con acidi nucleici e piccoli peptidi. Periodo: da Settembre 2015 ad oggi.
- Gruppo di ricerca: Prof. David K. Smith, Department of Chemistry, University of York, (UK). Tematica di ricerca: sistemi nanotecnologici autoassemblanti come nanovettori e/o ligandi multivalenti per polianioni di interesse biomedico (ad esempio, acidi nucleici e eparina). Attività di ricerca: nell'ambito di questa ricerca il dottor Marson ha condotto attività di ricerca sia di modellazione molecolare multiscala riguardante gli aspetti di progettazione dei nanosistemi a livello molecolare e sovramolecolare che di termodinamica di interazione tra tali nanovettori ed i polianioni di interesse biomedico. Periodo: da Gennaio 2015 ad oggi.
- Gruppo di ricerca: Prof. Enzo Di Fabrizio, KAUST University, the Kingdom of Saudi Arabia. Tematica di ricerca: approccio combinato di tecniche computazionali e sperimentali per lo studio e la caratterizzazione delle interazioni strutturali e chimico fisiche tra acidi nucleici e proteine e/o piccole molecole. Attività di ricerca: nell'ambito di questa ricerca il dottor Marson ha condotto attività di ricerca di modellazione molecolare multiscala dei sistemi studiati. Inoltre ha condotto attività di ricerca sperimentale nell'ambito della caratterizzazione strutturale e chimico-fisica dell'interazione proteina- proteina e proteina-DNA. Periodo: da Aprile 2017 ad oggi.
- Gruppo di ricerca: Prof. Francesco Stellacci, Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Lausanne, Svizzera. Tematica di ricerca: caratterizzazione strutturale sperimentale e computazionale multiscala di nanoparticelle d'oro funzionalizzate. Attività di ricerca: modellazione multiscala delle nanoparticelle studiate e loro interazione con membrane biologiche. Periodo: da Settembre 2015 a oggi.

Responsabilità di studi e ricerche scientifiche affidati da qualificate istituzioni pubbliche o private

Ott. 2013 – Lug. 2014

Dendrimer Illuminated Using what's offered by molecular simulation (DILUSO). Project ID: HP10CUVLZ3. Ente finanziante: CINECA. Call: ISCRA. Ruolo: **PI di progetto**. Durata del progetto: 9 mesi. Scopo della ricerca: *accesso alle strutture di HPC per l'esecuzione di simulazioni molecolari avanzate per lo studio conformazionale, termodinamico e cinetico di dendrimeri e loro interazione con proteine, acidi nucleici e membrane biologiche*

- Nov. 2014 – Ago, 2015 Keeping Eyes Peeled and Test Computational Advancement on Lipid Membranes (KEPTCALM). Project ID: HP10CX2X0K. Ente finanziante: CINECA. Call: ISCRA. Ruolo: **PI di progetto**. Durata del progetto: 9 mesi. Scopo della ricerca: *accesso alle strutture di HPC per l'esecuzione di simulazioni molecolari avanzate su cluster di GPU per lo studio dell'interazione e dell'attraversamento di membrane biologiche da parte di farmaci e nuove famiglie di dendrimeri.*
- Nov. 2015 – Ago, 2016 Molecular modelling, Objectives: dimerization and analysis at the nanoparticle biointerface. (MELODIA). Project ID: HP10CCABPW. Ente finanziante: CINECA. Call: ISCRA. Ruolo: **PI di progetto**. Durata del progetto: 9 mesi. Scopo della ricerca: *accesso alle strutture di HPC per l'esecuzione di simulazioni molecolari avanzate su cluster di GPU per lo studio multiscala di proteine di membrane e loro dimerizzazione.*
- Nov. 2018 – Ago, 2019 Understanding supramolecular-receptors capabilities of gold Nanoparticles. (supraNP). Project ID: HP10CZ1F92. Ente finanziante: CINECA. Call: ISCRA. Ruolo: **PI di progetto**. Durata del progetto: 9 mesi. Scopo della ricerca: *accesso alle strutture di HPC per l'esecuzione di simulazioni molecolari avanzate su cluster di GPU per lo studio multiscala di nanoparticelle d'oro funzionalizzate, loro caratterizzazione e studi dell'interazione con analiti e farmaci.*

Partecipazione o responsabilità scientifica per progetti di ricerca internazionali e nazionali ammessi al finanziamento sulla base di bandi competitivi che prevedano la revisione tra pari:

Nel corso della sua attività scientifica il dott. Marson ha preso parte attivamente a diversi progetti di ricerca, sia nel campo della scienza dei materiali che in quello delle scienze della vita.

- Gen. 2014 – Dic. 2016 Modelling of morphology development of micro- and nanostructures (MoDeNa). Grant agreement: 604271. Ente Finanziatore: European Commission. Call: FP7 NMP.213.1.4-1. Ruolo: ricercatore nell'unità locale. Scopo del progetto: la missione di MoDeNa è lo sviluppo, la dimostrazione e la verifica di una piattaforma software integrata e open-source di modellistica multiscala di facile utilizzo che fornisca la previsione di proprietà meccaniche e termo-fisiche per la progettazione e lo sviluppo di materiali complessi.
- Sett. 2015 – Sett. 2019 *Structure and FunctiOn at the Nanoparticle bioInterfAce* (SinFONIA). Ente finanziatore: Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca (MIUR), bando SIR (Scientific Independence of Young Researchers), codice proposta RBSI14PBC6. Ruolo: ricercatore nell'unità locale. Scopo del progetto: sviluppo e applicazione di tecniche computazionali multiscala per la modellazione di materiali nanostrutturali complessi.
- Gen. 2016 – Dic. 2018 Novel hot-spot mutations in BCR-ABL1: role in resistance to CML target therapy. Grant agreement: Id.17413. Ente Finanziatore: Associazione Italiana per la ricerca sul cancro. Call: IG 2015. Ruolo: junior scientist responsabile delle attività di modellazione molecolare del progetto. Scopo del progetto: Questo progetto si pone l'obiettivo di determinare il ruolo, a livello molecolare, di alcune nuove mutazioni dell'oncogene BCR-ABL1 scoperte dal gruppo del PI nella resistenza ai farmaci a terapia mirata nella leucemia mieloide cronica (durata totale del progetto: 3 anni).
- Dic. 2016 – Dic. 2019 Nanotechnology based immunotherapy for glioblastoma (NANOGLIO). Ente finanziatore: European Commission. Call: EURONANOMED II Joint

- Transnational Call for Proposals (2016) for “EUROPEAN INNOVATIVE RESEARCH & TECHNOLOGICAL DEVELOPMENT PROJECTS IN NANOMEDICINE”. Ruolo: ricercatore nell'unità locale. Scopo del progetto: Lo scopo di questo progetto è quello di progettare e sviluppare nuovi approcci immunoterapici basati su sistemi nanotecnologici per il trasporto e il rilascio mirato di agenti immunomodulanti per la cura del glioblastoma
- Gen. 2017 – Dic. 2018 Studio combinato in silico/in vitro delle alterazioni biomeccaniche e molecolari indotte da mutazioni della proteina Lamina A/C ed individuazione di specifici miRNA come biomarker per la cardiomiopatia dilatativa idiopatica. Call: Progetto FRA 2016. Ente finanziatore: Università degli Studi di Trieste. Ruolo: Task Leader del task 1 “Analisi computazionale delle proteine LMNA oggetto di studio”. Scopo del progetto: questo progetto di ricerca si pone l’obiettivo di fornire, attraverso un approccio combinato computazionale/sperimentale, una migliore comprensione dei processi biologici che regolano le proprietà di risposta agli stimoli meccanici delle cellule, in particolare di quelle cardiache, in presenza di mutazione genetica di Lamina contribuendo così alla possibilità di sviluppo di nuovi metodi di diagnosi ed approcci terapeutici per cardiomiopatie.
- Gen. 2017 – oggi Multi-scale Composite Material Selection Platform with a Seamless Integration of Material Models and Multidisciplinary Design Framework (COMPOSELECTOR). Grant agreement: 721105. Ente Finanziatore: European Commission. Call: H2020-NMBP-2016-2017 NMBP-23-2016. Ruolo: junior scientist e responsabile dell’attività di linking ed embedding di modelli molecolari alle diverse scale. Scopo del progetto: la missione di COMPOSELECTOR è lo sviluppo di un sistema di supporto decisionale al business (BDSS), che integri modellistica multiscale dei materiali, strumenti aziendali e basi di dati in un unico diagramma di flusso per supportare il complesso processo decisionale alla base della selezione della progettazione di materiali nanocompositi a matrice polimerica (durata totale del progetto: 4 anni).
- Feb. 2017 – Feb 2020 New designed triazoloquinolones in combination with Pgp inhibitors as useful chemical probe to investigate quinolone resistance in Mycobacterium Tuberculosis: an approach to face an old re-emerging disease with new tools. Ente finanziatore: MIUR. Call: PRIN 2015. Ruolo: ricercatore nell'unità locale. Scopo del progetto: lo scopo di questo progetto è di utilizzare un approccio sinergico computazionale/sperimentale per lo sviluppo di nuovi e più efficienti farmaci antitubercolari.
- Apr. 2017 – Dic. 2018 Plastic Cover For Marine Engine (PlastiCo). Call: PORFESR2014-2020 - Attività 1.3.b – Ricerca e sviluppo. Ente finanziatore: Regione Autonoma Friuli Venezia-Giulia. Ruolo: ricercatore nell'unità locale. Scopo del progetto: lo scopo di questo progetto è quello di selezionare il miglior materiale plastico tra differenti formulazioni polimeriche nanocomposite per una cover da utilizzare su motori marini. I materiali nanocompositi progettati ed ottimizzati tramite l'utilizzo di avanzate tecniche di Simulazione molecolare, saranno preparati in scala di laboratorio e testati alle condizioni di impiego, fornendo un ampliamento della caratterizzazione per quelle proprietà che non possono essere valutate in via numerica.
- Apr. 2017 – oggi Novel direct TEM imaging of DNA, DNA proteins interaction and cell Membrane structure. Call: King Abdullah University of Science and Technology's Competitive Research Grant Program-Round 5 (CRG5). Ente finanziatore: King Abdullah University of Science and Technology, Thuwal (Arabia Saudita). Ruolo: junior scientist responsabile della parte di modellazione molecolare del progetto. Scopo del progetto: lo scopo di questo progetto è uno studio combinato

sperimentale/computazionale delle interazioni tra sistemi biologici (ad esempio, DNA o RNA/proteina), e della struttura di canali ionici in membrana (durata totale del progetto: 3 anni).

Mag. 2019 – oggi

Studio dell'oncogene BRAF e delle sue mutazioni per la selezione di pazienti affetti da melanoma eleggibili per le terapie mirate con inibitori specifici. Ente finanziatore: Regione Autonoma Friuli Venezia Giulia. Call: Bando 2017 per la concessione di contributi per la ricerca clinica, traslazionale, di base, epidemiologica, e organizzativa, art. 15, comma 2, lett. b), legge regionale 17/2014. Ruolo: junior scientist responsabile della parte di modellazione molecolare del progetto. Scopo del progetto: un approccio multidisciplinare per la caratterizzazione strutturale, funzionale e di risposta agli inibitori specifici delle mutazioni non-V600 di BRAF osservate in pazienti con melanoma non eleggibili per le terapie mirate.

Conseguimento di premi e riconoscimenti per l'attività scientifica

- Finalista alla competizione NanoChallenge/Polymer Challenge Competition per idee ed iniziative di start-up, Palazzo del Bo, Padova, 31 ottobre 2012, con l'idea di start-up "EpyDine".
- Cover del volume 9 (2) della rivista scientifica "Molecular Oncology" per l'articolo "Smoothed (SMO) receptor mutations dictate resistance to vismodegib in basal cell carcinoma"; Volume 9 | Issue 2 | February 2015 | Pages 389–397.
- Finalista della competizione Start-Cup FVG 2015 Competition per idee di progetto e start-ups, Piazza San Giacomo, Udine, 3 luglio 2015, con l'idea di start-up "SmartNanoLab".
- Cover del volume 140 (47) della rivista scientifica "Journal of the American Chemical Society" per la pubblicazione "A Dual Targeting Dendrimer-Mediated siRNA Delivery System for Effective Gene Silencing in Cancer Therapy", Volume 140 | Issue 47 | Oct 2018 | Pages 16264–16274.
- Premio "Best young communication award" alla "2018 Conference on Foundations of Molecular Modelling and Simulation (FOMMS 2018)" per la comunicazione "In silico/in vitro Combined Study of the Biomechanical and Molecular Alterations Induced by Lamin A/C Protein Mutations", Delaware, USA.
- Premio "Young Investigator Award in Computational Sciences" al congresso Third International Computational Science and Engineering Conference (ICSEC19), per la comunicazione orale "Positive vibrations! Computational/experimental characterization of nanomechanical DNA resonators as sensors for life science applications", 22 Ottobre 2019, Doha, Qatar.

Produzione scientifica

Ad oggi l'attività di ricerca del dott. Marson si è concretizzata nella seguente produzione scientifica:

- Contributi in riviste internazionali: **30**
- Contributi in volume: **3**
- Contributi in atti di convegno, suddivisi in:
 - Comunicazioni orali: **5**
 - Comunicazioni poster: **19**

- Parametri bibliometrici (al 07 agosto 2020):
 - Fonte SCOPUS. *h-index*: **10**, n° citazioni: **410**
 - Fonte GOOGLE SCHOLAR *h-index*: **11**, n° citazioni: **523**, *i10-index*: **12**

In particolare gli oggetti di studio del dott. Marson possono essere suddivisi in:

- design di nanovettori destinati alla terapia genica e determinazione delle relazioni struttura–proprietà per diversi complessi dendrimero/proteina o dendrimero/acido nucleico^{6, 7, 9, 13, 14, 18, 19, 23, 25, 28-30, 32}
- interazioni farmaco–proteina, implementando metodologie per la determinazione delle relazioni struttura–attività e stabilità termodinamica, nello specifico per studiare^{1, 12, 26, 27, 31, 33} (i) diverse famiglie di ligandi e (ii) mutazioni puntiformi della proteina, coinvolte in gravi patologie tumorali o utilizzate per descriverne il sito di legame
- sviluppo di metodologie per la simulazione di membrane lipidiche e lo studio di interazioni tra proteine/dendrimeri/nanoparticelle e membrane biologiche²¹
- sviluppo di metodologie per la simulazione di nanoparticelle d'oro funzionalizzate da monostrati di ligandi di diversa natura chimica, e studio dell'interazione di queste nanoparticelle con membrane lipidiche e proteine^{2, 3, 8, 17, 20, 22, 24}
- determinazione delle proprietà di materiali nanocompositi polimerici^{15, 16}
- determinazioni delle proprietà meccaniche di macromolecole biologiche^{4, 10, 11}
- sviluppo di metodologie per la simulazione a livello atomistico di fogli di ossido di grafene funzionalizzati e presentanti difetti strutturali, e lo studio di interazioni tra essi e acidi nucleici/peptidi⁵

Lavori su giornali internazionali

1. Laurini, E.; Marson, D.; Fermeglia, A.; Aulic, S.; Fermeglia, M.; Pricl, S., Role of Rad51 and DNA repair in cancer: A molecular perspective. *Pharmacol Ther* **2020**, *208*, 107492.
2. Marson, D.; Laurini, E.; Aulic, S.; Fermeglia, M.; Pricl, S., Perceptions and Misconceptions in Molecular Recognition: Key Factors in Self-Assembling Multivalent (SAMul) Ligands/Polyanions Selectivity. *Molecules* **2020**, *25* (4).
3. Marson, D.; Posel, Z.; Posocco, P., Molecular Features for Probing Small Amphiphilic Molecules with Self-Assembled Monolayer-Protected Nanoparticles. *Langmuir* **2020**, *36* (20), 5671-9.
4. Abrami, M.; Marizza, P.; Zecchin, F.; Bertoncin, P.; Marson, D.; Lapasin, R.; de Riso, F.; Posocco, P.; Grassi, G.; Grassi, M., Theoretical Importance of PVP-Alginate Hydrogels Structure on Drug Release Kinetics. *Gels* **2019**, *5* (2), 22.
5. De Lázaro, I.; Vranic, S.; Marson, D.; Rodrigues, A. F.; Buggio, M.; Esteban-Arranz, A.; Mazza, M.; Posocco, P.; Kostarelos, K., Graphene oxide as a 2D platform for complexation and intracellular delivery of siRNA. *Nanoscale* **2019**.
6. Ding, L.; Lyu, Z.; Tintaru, A.; Laurini, E.; Marson, D.; Louis, B.; Bouhlef, A.; Balasse, L.; Fernandez, S.; Garrigue, P.; Mas, E.; Giorgio, S.; Pricl, S.; Guillet, B.; Peng, L., A self-assembling amphiphilic dendrimer nanotracer for SPECT imaging. *Chem Commun* **2019**, *56* (2), 301-4.
7. Laurini, E.; Marson, D.; Aulic, S.; Fermeglia, M.; Pricl, S., Evolution from Covalent to Self-Assembled PAMAM-Based Dendrimers as Nanovectors for siRNA Delivery in Cancer by Coupled in Silico-Experimental Studies. Part II: Self-Assembled siRNA Nanocarriers. *Pharmaceutics* **2019**, *11* (7), 324.
8. Marson, D.; Guida, F.; Sologan, M.; Boccardo, S.; Pengo, P.; Perissinotto, F.; Iacuzzi, V.; Pellizzoni, E.; Polizzi, S.; Casalis, L.; Pasquato, L.; Pacor, S.; Tossi, A.; Posocco, P., Mixed Fluorinated/Hydrogenated Self-Assembled Monolayer-Protected Gold Nanoparticles: In Silico and In Vitro Behavior. *Small* **2019**, *15* (17), e1900323.
9. Marson, D.; Laurini, E.; Aulic, S.; Fermeglia, M.; Pricl, S., Evolution from Covalent to Self-Assembled PAMAM-Based Dendrimers as Nanovectors for siRNA Delivery in Cancer by Coupled In Silico-Experimental Studies. Part I: Covalent siRNA Nanocarriers. *Pharmaceutics* **2019**, *11* (7), 351.
10. Parisi, E.; Garcia, A. M.; Marson, D.; Posocco, P.; Marchesan, S., Supramolecular Tripeptide Hydrogel Assembly with 5-Fluorouracil. *Gels* **2019**, *5* (1), 5.
11. Stassi, S.; Marini, M.; Allione, M.; Lopatin, S.; Marson, D.; Laurini, E.; Pricl, S.; Pirri, C. F.; Ricciardi, C.; Di Fabrizio, E., Nanomechanical DNA resonators for sensing and structural analysis of DNA-ligand complexes. *Nat Commun* **2019**, *10* (1), 1690.

12. Zampieri, D.; Cateni, F.; Moneghini, M.; Zacchigna, M.; Laurini, E.; Marson, D.; De Logu, A.; Sanna, A.; Mamolo, M. G., Imidazole and 1,2,4-Triazole-based Derivatives Gifted with Antitubercular Activity: Cytotoxicity and Computational Assessment. *Curr Top Med Chem* **2019**, *19* (8), 620-32.
13. Dong, Y.; Yu, T.; Ding, L.; Laurini, E.; Huang, Y.; Zhang, M.; Weng, Y.; Lin, S.; Chen, P.; Marson, D.; Jiang, Y.; Giorgio, S.; Pricl, S.; Liu, X.; Rocchi, P.; Peng, L., A Dual Targeting Dendrimer-Mediated siRNA Delivery System for Effective Gene Silencing in Cancer Therapy. *J Am Chem Soc* **2018**, *140* (47), 16264-74.
14. Garrigue, P.; Tang, J.; Ding, L.; Bouhlel, A.; Tintaru, A.; Laurini, E.; Huang, Y.; Lyu, Z.; Zhang, M.; Fernandez, S.; Balasse, L.; Lan, W.; Mas, E.; Marson, D.; Weng, Y.; Liu, X.; Giorgio, S.; Iovanna, J.; Pricl, S.; Guillet, B.; Peng, L., Self-assembling supramolecular dendrimer nanosystem for PET imaging of tumors. *Proc Natl Acad Sci U S A* **2018**, *115* (45), 11454-9.
15. Laurini, E.; Marson, D.; Aulic, S.; Mio, A.; Fermeglia, M.; Pricl, S., Integrating Multiscale Simulations for Composite Materials with Industrial Business Decision: the Eu H2020 COMPOSELECTOR Project Experience. *Chemical Engineering Transactions* **2018**, *74*, 619- 24.
16. Laurini, E.; Marson, D.; Fermeglia, M.; Pricl, S., Multimodel approach for accurate determination of industry-driven properties for Polymer Nanocomposite Materials. *J Comput Sci-Neth* **2018**, *26*, 28-38.
17. Luo, Z.; Marson, D.; Ong, Q. K.; Loiudice, A.; Kohlbrecher, J.; Radulescu, A.; Krause-Heuer, A.; Darwish, T.; Balog, S.; Buonsanti, R.; Svergun, D. I.; Posocco, P.; Stellacci, F., Quantitative 3D determination of self-assembled structures on nanoparticles using small angle neutron scattering. *Nat Commun* **2018**, *9* (1), 1343.
18. Marson, D.; Laurini, E.; Aulic, S.; Fermeglia, M.; Pricl, S., Self-assembling Nanotechnology for Cancer Personalized Medicine. *Chemical Engineering Transactions* **2018**, *74*, 1549-54.
19. Marson, D.; Laurini, E.; Fermeglia, M.; Smith, D. K.; Pricl, S., Mallard Blue binding to heparin, its SDS micelle-driven de-complexation, and interaction with human serum albumin: A combined experimental/modeling investigation. *Fluid Phase Equilib* **2018**, *470*, 259-67.
22. Pengo, P.; Sologan, M.; Pasquato, L.; Guida, F.; Pacor, S.; Tossi, A.; Stellacci, F.; Marson, D.; Boccardo, S.; Pricl, S.; Posocco, P., Gold nanoparticles with patterned surface monolayers for nanomedicine: current perspectives. *Eur Biophys J* **2017**, *46* (8), 749-71.
23. Laurini, E.; Marson, D.; Posocco, P.; Fermeglia, M.; Pricl, S., Structure and binding thermodynamics of viologen-phosphorous dendrimers to human serum albumin: A combined computational/experimental investigation. *Fluid Phase Equilib* **2016**, *422*, 18-31.
24. Sologan, M.; Marson, D.; Polizzi, S.; Pengo, P.; Boccardo, S.; Pricl, S.; Posocco, P.; Pasquato, L., Patchy and Janus Nanoparticles by Self-Organization of Mixtures of Fluorinated and Hydrogenated Alkanethiolates on the Surface of a Gold Core. *Acs Nano* **2016**, *10* (10), 9316-25.
25. Marson, D.; Laurini, E.; Posocco, P.; Fermeglia, M.; Pricl, S., Cationic carbosilane dendrimers and oligonucleotide binding: an energetic affair. *Nanoscale* **2015**, *7* (9), 3876-87.
26. Pricl, S.; Cortelazzi, B.; Dal Col, V.; Marson, D.; Laurini, E.; Fermeglia, M.; Licitra, L.; Pilotti, S.; Bossi, P.; Perrone, F., Smoothed (SMO) receptor mutations dictate resistance to vismodegib in basal cell carcinoma. *Mol Oncol* **2015**, *9* (2), 389-97.
27. Brune, S.; Schepmann, D.; Klempnauer, K. H.; Marson, D.; Dal Col, V.; Laurini, E.; Fermeglia, M.; Wunsch, B.; Pricl, S., The sigma enigma: in vitro/in silico site-directed mutagenesis studies unveil sigma1 receptor ligand binding. *Biochemistry-us* **2014**, *53* (18), 2993-3003.
28. Laurini, E.; Harel, D.; Marson, D.; Schepmann, D.; Schmidt, T. J.; Pricl, S.; Wunsch, B., Identification, pharmacological evaluation and binding mode analysis of novel chromene and chromane based sigma1 receptor ligands. *Eur J Med Chem* **2014**, *83*, 526-33.
30. Posocco, P.; Liu, X.; Laurini, E.; Marson, D.; Chen, C.; Liu, C.; Fermeglia, M.; Rocchi, P.; Pricl, S.; Peng, L., Impact of siRNA overhangs for dendrimer-mediated siRNA delivery and gene silencing. *Mol Pharm* **2013**, *10* (8), 3262-73.
31. Laurini, E.; Marson, D.; Dal Col, V.; Fermeglia, M.; Mamolo, M. G.; Zampieri, D.; Vio, L.; Pricl, S., Another Brick in the Wall. Validation of the σ 1 Receptor 3D Model by Computer-Assisted Design, Synthesis, and Activity of New σ 1 Ligands. *Mol Pharmaceut* **2012**, *9* (11), 3107-26.

32. Marson, D.; Dal Col, V.; Posocco, P.; Laurini, E.; Fermeglia, M.; Pricl, S., Genes within Bottles. Synergism Between Simulation and Experiment in Designing Nanovectors for DNA/RNA Delivery. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly* **2012**, 26 (4), 447-65.

33. Posocco, P.; Laurini, E.; Dal Col, V.; Marson, D.; Karatasos, K.; Fermeglia, M.; Pricl, S., Tell Me Something I Do Not Know. Multiscale Molecular Modeling of Dendrimer/Dendron Organization and Self-Assembly In Gene Therapy. *Curr Med Chem* **2012**, 19 (29), 5062 87.

Libri e capitoli di libri

20. Marson, D.; Yang, Y.; Guldin, S.; Posocco, P., Noble metal nanoparticles with anisotropy in shape and surface functionality for biomedical applications. In *Anisotropic Part Assemblies*, 2018; pp 313-33.

21. Laurini, E.; Marson, D.; Fermeglia, M.; Pricl, S., 3D Homology Model of Sigma1 Receptor. In *Handbook of experimental pharmacology*, 2017; Vol. 244, p 27 50.

29. Posocco, P.; Laurini, E.; Marson, D.; Smith, D. K.; Klajnert, B.; Bryszewska, M.; Caminade, A.-M.; Majoral, J.-P.; Fermeglia, M.; Karatasos, K.; Pricl, S.; Peng, L., Multiscale modeling of dendrimers and dendrons for drug and nucleic acid delivery. Barbara Klajnert, L. P. V. C., Ed. Royal Society of Chemistry: 2013.

Partecipazione a convegni di carattere scientifico nazionali e internazionali

Partecipazione come relatore di presentazione orale:

- O1) **Marson, D.**; Mio, A.; Laurini, E.; Aulic, S.; Fermeglia, M.; Pricl, S., “It Takes Two to Tango! Examples of Experiments/Simulations Combinations to Tackle Cancer Biology”, AIChE annual meeting, 10-15 Novembre 2019, Orlando (USA).
- O2) **Marson, D.**, “Positive vibrations! Computational/experimental characterization of nanomechanical DNA resonators as sensors for life science applications”, the 3rd International Computational Science and Engineering Conference (ICSEC) 23-24 Ottobre 2019, Doha (Qatar).
- O3) **Marson, D.**; Mio, A.; Laurini, E.; Pricl, S.; Fermeglia, M., “La teranostica personalizzata per il cancro attraverso nanocomposti auto-assemblanti, convegno GRICU, 30 Giugno – 3 Luglio 2019, Palermo (Italia).
- O4) **Marson D.**; Laurini E.; Aulic S.; Fermeglia M.; Pricl S., “Self-assembling nanotechnology for cancer personalized medicine”, 14th International Conference on Chemical and Process Engineering (ICheap14), 26-29 Maggio 2019, Bologna (Italia).
- O5) **Marson, D.**; Laurini, E.; Fermeglia, M.; Pricl, S., “Multiscale molecular simulations for nanocomposite materials”, First International Conference on Mechanics of Advanced Materials and Structures (ICMAMS), 17-20 Giugno 2018, Torino (Italia).

Partecipazione con poster:

- C1) Abrami M, Marizza P, Zecchin F, Bertocin P, **Marson D**, Lapasin R, de Riso F, Posocco P, Grassi G, Grassi M. “Importance of hydrogels network characteristics on drug release kinetics”, Eighth World Conference on Physico-Chemical Methods in Drug Discovery & Fifth World Conference on ADMET and DMPK, September 9-11 2019, Split, Croatia.
- C2) **Marson D**, Aulic S, Laurini E, Fermeglia M, Marini M, Di Fabrizio E, Pricl S. “Breaking bad: DNA Repair and its Guardian angel Protein RAD51. Novel Computational/Experimental Approaches to DNA/Proteins Interactions”, July 15-20 2018, Foundations of Molecular Modeling and Simulation (FOMMS), Delavan, WI, USA.
- C3) Laurini E, Aulic S, **Marson D**, Fermeglia M, Pricl S. “Novel Hot Spot Mutations in BCR-ABL1: a Personalised Medicine Approach in Chronic Myeloid Leukaemia”, Personalized and Precision Medicine International Conference (PEMED2018), June 25-27 2018, Paris, France.
- C4) Boccardo S, Guida M, Sologan M, **Marson D**, Pengo P, Pricl S, Tossi A, Pasquato L, Posocco P, Pacor S. “Membranes & Proteins Vs Engineered Nanoparticles: A Computational and Experimental Investigation at the Bio-Nanointerface”, International Conference on Nanomedicine and Nanobiotechnology (ICONAN2017), September 25-27 2017, Barcelona, Spain.

- C5) Laurini E, Posocco P, **Marson D**, Fermeglia M, Pricl S. Modeling: a tool for experimentalists. design, synthesis and evaluation of self-assembling dendrons for gene/drug delivery. AIChE Annual Meeting, November 13-18 2016, San Francisco, CA, USA
- C6) Guida F, Şologan M, **Marson D**, Boccardo S, Pricl S, Pasquato L, Tossi A, Pacor S, Posocco P, “Insights On The Morphology And Biological Activity Of Gold Nanoparticles Protected By Self-Assembling Mixtures Of Ligands”, Regional Biophysical Conference, August 25-28 2016, Trieste, Italy.
- C7) **Marson, D**, Şologan M, Boccardo S, Pengo P, Pricl S, Pasquato L, Posocco P, “CLEAR! Computational and Experimental design Rules in tailoring the monolayer organization of fluorocarbon/hydrocarbon thiolates mixtures on gold nanoparticles”, Nanoparticles with Morphological and Functional Anisotropy: Faraday Discussion, July 4-6 2016, Glasgow, UK.
- C8) Laurini E, **Marson D**, Posocco P, Fermeglia M, Pricl S. Synthesis and activity of computer- designed nanovectors for gene and drug delivery. V Congresso Nazionale di Bioingegneria, 20-22 giugno, Università di Napoli Federico II, Napoli
- C9) Laurini E, Posocco P, **Marson D**, Fermeglia M, Pricl S. Combined computational/experimental approach to the thermodynamics of biomolecular interactions. Convegno GRICU 2016 Gli orizzonti 2020 dell’Ingegneria Chimica, 2016 September 12-14, Anacapri, Italy
- C10) Posocco P, Laurini E, **Marson D**, Pricl S, Fermeglia M. iCOMEX: an integrated computational – experimental approach for the design of advanced nano-bio systems. 14th International Conference on Properties and Phase Equilibria for Product and Process Design (PPEPPD2016), May 22-26, Porto, Portugal
- C11) Laurini E, **Marson D**, Posocco P, Smith DK, Fermeglia M, Pricl S, DNA likes it one-way, heparin does it both ways: mechanisms of self-assembled, multivalent nanovectors selectivity towards these two fundamental polyanions. 8th International Conference Times of Polymers and Composites (TOP), 2016 June 19-23, Ischia, Italy
- C12) Pricl S, Fermeglia M, Posocco P, **Marson D**, Laurini E. Of (computers, cells) mice and men: Integration of simulations and experiments in molecular medicine. First International Computational Science and Engineering Conference (ICSEC15), 2015 May 11-12, Doha, Qatar
- C13) Pricl S, Posocco P, Laurini E, Dal Col V, **Marson D**, Fermeglia M. E pluribus unum: smart self-assembling materials in nanomedicine. Eurofillers and Polymer Blends 2015, 2015 April 26-30, Montpellier, France
- C14) **Marson D**, Laurini E, Posocco P, Peng L, Klajnert B, Majoral J-P, Caminade A-M, Pricl S. Odd Man Out: molecular dynamic studies on dendrimers and their interactions with albumin and oligodeoxynucleotides. 22nd National Meeting on Medicinal Chemistry, 2013 September 10-13, Rome, Italy
- C15) **Marson D**, Dal Col V, Barnard A, Jones SP, Laurini E, Posocco P, Smith Dk, Fermeglia M, Pricl S. Nanozapped! DNA and its dendritic nanovectors: a combined in silico/in vitro approach. Foundations of Molecular Modeling and Simulation 2012 (FOMMS2012), 2012 July 22-26, Mt. Hood, OR, USA
- C16) Laurini L, Dal Col V, **Marson D**, Curti D, Collina S, Leuner K, Wunsch B, Pricl S The sigma enigma. 3D homology modelling, computer-assisted drug design, 3D pharmacophore- guided docking, MM/PBSA scoring, in silico/in vitro alanine scanning mutagenesis, and functional assays to unveil the sigma-1 receptor hidden secrets. Foundations of Molecular Modeling and Simulation 2012 (FOMMS2012), 2012 July 22-26, Mt. Hood, OR, USA
- C17) Dal Col V, Laurini E, Posocco P, **Marson D**, Wang Q, Fermeglia M, Peng L, Pricl S. Catch me if you can: ligand/antibody conjugated PAMAM dendrimer. 7e Rencontre de Chimie Organique de Marseille, 2012 June 14-15, Saint-Jérôme, France
- C18) **Marson D**, Dal Col V, Posocco P, Laurini E, Fermeglia M, Pricl S, Ciepluch K, Klajnert B, Bryszewska M, Katir N, El Kadib, Caminade A-M, Majoral JP. Dendrimers and albumin: friends or foes? A preliminary quantitative structure-toxicity relationship for viologen- phosphorous dendrimers. 3rd International Symposium on Biological Applications of Dendrimers (BIO-dendrimer2012), 2012 September 5-8, Toledo, Spain
- C19) Posocco P, **Marson D**, Dal Col V, Laurini E, Fermeglia M, Pricl S, Barnard A, Rodrigo AC, Bromfield SM, Smith DK. E pluribus unum. Ionic strength-mediated interactions between self-assembled dendrons and heparin. 3rd International Symposium on Biological Applications of Dendrimers (BIO-dendrimer2012), 2012 September 5-8, Toledo, Spain

Trieste, 07 agosto 2020

Firma



Autorizzo al trattamento dei dati personali ai sensi della L. 675/96 e s.m.i.