

**CURRICULUM VITAE**  
**ET**  
**STUDIORUM**

Prof. Stefano Alcaro

<b>INFORMAZIONI PERSONALI</b>	
Nome e cognome:	Stefano Alcaro
Luogo e data di nascita:	
Codice fiscale:	
Nazionalità:	Italiana
Stato civile:	
Residenza:	
Domicilio:	
Altro recapito:	
Telefono:	
Fax:	
E-mail:	alcaro@unicz.it
Lingue:	italiano e inglese
Obblighi di leva:	assolto come Allievo Ufficiale di Complemento in Sanità Militare – 108° corso AUC
Attività professionale:	Professore Universitario
<b>ISTRUZIONE E FORMAZIONE</b>	<p><b>17 luglio 1990</b> Università degli Studi “La Sapienza” di Roma. Laurea in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche. (110 e lode)</p> <p><b>18 luglio 1995</b> Università degli Studi “La Sapienza” di Roma. Laurea in Farmacia. (110 e lode)</p> <p><b>23 novembre 1995</b> Università degli Studi “La Sapienza” di Roma. Dottore di Ricerca in Farmacologia, Farmacognosia e Tossicologia</p>
<b>ATTIVITÀ SCIENTIFICA</b>	<b>1997</b>
<b>Date (dal – al):</b>	<b>Componente</b> del progetto NATO triennale dal titolo “Computer Modeling of Azinomycin / DNA Interaction” (CRG 970160). La borsa NATO ha consentito tre visite del prof. Alcaro presso i Laboratori del prof. R. S. Coleman (Ohio-State University, Columbus, OH, USA): 15-28 giu 1997, 7-17 dic 1997, 28 mar – 4 apr 1999.
<b>SEGUE ATTIVITÀ SCIENTIFICA</b>	<p><b>2001</b> <b>Responsabile scientifico</b> dell’unità di ricerca sul progetto annuale “Nuovi antitumorali a scheletro tassanico” presentato dall’industria farmaceutica INDENA S.p.A. al MURST.</p> <p><b>2001</b> <b>Responsabile scientifico</b> del Progetto Giovani CNR annuale dal titolo “Studio computazionale delle interazioni tra molecole biologicamente attive ed acidi nucleici” CNRG0037AE dell’Agenzia 2000 del Consiglio Nazionale delle Ricerche.</p> <p><b>2002</b> <b>Responsabile scientifico</b> dell’unità di ricerca di chimica computazionale su “Nuovi ligandi bioattivi sul recettore dello Stem Cell Factor” nell’ambito del Progetto CLUSTER coordinato dal Prof. Salvatore Venuta.</p>

**2002**

**Responsabile scientifico** del progetto annuale “Studio computazionale su nuovi antitumorali analoghi della tiocolchicina”, presentato dall’industria farmaceutica INDENA S.p.A. al MURST.

**2003**

**Responsabile scientifico** dell’unità operativa di chimica computazionale nell’ambito del progetto “Uso di tecnologie innovative per l’identificazione di bersagli molecolari nelle patologie neoplastiche sporadiche ed ereditarie” del Ministero della Salute.

**2007**

**Responsabile scientifico** dell’unità operativa di chimica farmaceutica di Catanzaro per Programmi di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale (PRIN 2007 codice 2007JERJPC\_002) sul tema “Progettazione, sintesi e valutazione biologica di nuovi inibitori delle cicloossigenasi”, durata 24 mesi a partire dal 22 settembre 2008.

**2008**

**Responsabile scientifico** dell’unità operativa di chimica farmaceutica di Catanzaro per progetti per il Fondo per gli Investimenti della Ricerca di Base (FIRB-IDEAS codice RBID082ATK\_002) sul tema “Nuovi farmaci per la terapia anticancro mirata”, durata 6,5 anni, decorrenza: 04/02/2009 - 04/08/2015.

**2009**

**Responsabile scientifico** dell’unità operativa di ricerca per conto terzi regolamentata dalla convenzione con la VIMEJO srl per sperimentazioni sul tema “Valutazione dell’attività nefrolitiasica dell’integratore alimentare naturale in forma di soluzione acquosa”.

**2009**

**Responsabile scientifico** dell’unità operativa di chimica farmaceutica di Catanzaro per Programmi di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale (PRIN 2009 codice 2009MFRKZ8\_002) sul tema “Progettazione razionale e sintesi di ligandi in grado di riconoscere acidi nucleici in conformazione a quadrupla elica”, durata 24 mesi a partire dal 17 settembre 2011.

**2013**

**Responsabile scientifico** dell’unità operativa di chimica farmaceutica di Catanzaro per il progetto di formazione di personale ad alta qualificazione professionale per conto dell’azienda farmaceutica Dompè (L’Aquila) nell’ambito del progetto PON01\_00862.

**2014**

**Responsabile scientifico** dell’unità operativa di chimica farmaceutica di Catanzaro per il progetto di ricerca dal titolo “Studio *in silico* di composti bioattivi” per conto dell’azienda farmaceutica Dompè (L’Aquila) nell’ambito del progetto PON01\_008621 1 agosto 2014 - 31 maggio 2015.

**2016**

**Coordinatore internazionale** della COST Action CA15135 “Multi-target paradigm for innovative ligand identification in the drug discovery process (MuTaLig)” [www.cost.eu/COST\\_Actions/ca/CA15135](http://www.cost.eu/COST_Actions/ca/CA15135) approvata dalla Association COST Horizon 2020 il 30 ottobre 2015. Decorrenza 18 Aprile 2016 – 17 Ottobre 2020.

**2017**

**Rappresentante per l’Italia (MC member)** della COST Action CA16205 “European Network on Understanding Gastrointestinal Absorption-related Processes (UNGAP)” [www.ungap.eu](http://www.ungap.eu). Decorrenza 24 Ottobre 2017 - 23 Ottobre 2021.

**2019**

**Coordinatore internazionale** del Paul Ehrlich Euro-PhD Network [www.pehrlichmedchem.eu](http://www.pehrlichmedchem.eu) da gennaio 2019 a dicembre 2021

**2019**

	<p><b>Coordinatore nazionale</b> del Programma di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale (PRIN 201744BN5T) LINEA SUD dal titolo “Nuovi agenti antitumorali dotati di meccanismo di azione multi-targeting” Decorrenza 29 Agosto 2019 - 28 Agosto 2022.</p> <p>Stefano Alcaro svolge attività di referee per le seguenti riviste:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Journal of American Chemical Society</li> <li>• Journal of Medicinal Chemistry</li> <li>• European Journal of Medicinal Chemistry</li> <li>• Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters</li> <li>• Bioinformatics</li> </ul>
<p><b>ATTIVITÀ DIDATTICA</b> <b>Date (dal – al):</b></p>	<p><b>2 settembre 1996- 22 dicembre 2002</b> Università degli Studi Magna Græcia di Catanzaro, già Università degli Studi di Reggio Calabria. Ricercatore SSD CHIM/08 (Chimica Farmaceutica) ex C07X.</p> <p><b>23 dicembre 2002 – 16 giugno 2011</b> Università degli Studi Magna Græcia di Catanzaro. Professore di II fascia SSD CHIM/08 (Chimica Farmaceutica).</p> <p><b>17 giugno 2011 ad oggi</b> Università degli Studi Magna Græcia di Catanzaro. Professore di I fascia SSD CHIM/08 (Chimica Farmaceutica).</p>
<p><b>RICONOSCIMENTI</b> <b>Date (dal – al):</b></p>	<p>Premio per il miglior contributo poster al dal titolo <i>Molecular modeling of "taxane based analogs"</i>, presentato al Fourth European Congress of Pharmaceutical Science (EUFEPS), Milano, 11-13 settembre <b>1998</b>.</p> <p>Premio “Outstanding Reviewer” per le attività di referaggio prestate alla rivista Journal Medicinal Chemistry dell’American Chemical Society negli anni <b>2013-2019</b>.</p> <p>Premio ANGI (Associazione Nazionale Giovani Innovatori) per attività di ricerca innovativa nell’ambito dello spinoff Net4Science, Roma 2-4 <b>dicembre 2020</b>.</p>
<p><b>SOCIETÀ SCIENTIFICHE</b> <b>Date (dal – al):</b></p>	<p>Dal <b>1991</b> è affiliato all’Ordine professionale dei Farmacisti della Provincia di Catanzaro.</p> <p>Dal <b>1996</b> è membro della Società Chimica Italiana (SCI) Divisione di Chimica Farmaceutica e Chimica degli Alimenti. È attualmente componente del Direttivo della Divisione di Chimica Farmaceutica.</p> <p>Dal <b>2011</b> è referente per l’ Università degli Studi Magna Græcia di Catanzaro del Paul Ehrlich Euro-PhD Network di cui, nel <b>2016</b>, diventa componente del direttivo internazionale. Dal <b>2019</b> è Coordinatore del Paul Ehrlich Euro-PhD Network per il triennio 2019-2021.</p> <p>Dal <b>2014</b> è membro della Società Italiana per la Ricerca sugli Oli Essenziali (SIROE).</p> <p>Dal <b>2018</b> è membro del Consiglio di Amministrazione del Centro CRISEA in località Condoleo (Belcastro, CZ).</p> <p>Dal <b>2019</b> è presidente del Centro CRISEA in località Condoleo (Belcastro, CZ).</p>

<p><b>CARICHE ACCADEMICHE</b> <b>Date (dal – al):</b></p>	<p><b>2004</b> Presidente della commissione CIVR dell'Università Magna Græcia di Catanzaro per l'Area Chimica relativa al triennio 2001-2003.</p> <p><b>2004 - 2011</b> Rappresentante per i professori di II fascia al Consiglio di Amministrazione dell'Università Magna Græcia di Catanzaro.</p> <p><b>2007 ad oggi</b> Componente delle Commissioni di Ateneo per l'Orientamento, Mobilità internazionale, Lavoro &amp; Impresa.</p> <p><b>2011-2014</b> Componente della Giunta del Dipartimento di Scienze della Salute dell'Università Magna Græcia di Catanzaro.</p> <p><b>2013 ad oggi</b> Coordinatore del Dottorato in Scienze della Vita dell'Università Magna Græcia di Catanzaro.</p> <p><b>2014 ad 2017</b> Componente del Consiglio di Scuola di Farmacia e Nutraceutica dell'Università Magna Græcia di Catanzaro.</p> <p><b>16 febbraio 2015 ad oggi</b> Componente della Commissione Tecnica Brevetti ed Invenzioni dell'Università degli Studi Magna Græcia di Catanzaro, istituita con D.R. n° 108 del 16/02/2015.</p> <p><b>21 maggio 2019 ad oggi</b> Delegato di Ateneo per le misure di Internazionalizzazione</p>
<p><b>PUBBLICAZIONI</b></p>	<p>Stefano Alcaro è autore di oltre 230 pubblicazioni su riviste internazionali a referaggio anonimo. H- Index = 42 (fonte Scopus, 22 febbraio 2021) VQR 2004-2010 = AAA (3 prodotti su 3) VQR 2011-2014 = AA (2 prodotti su 2) Risulta tra i TIS nell'area chimica (<a href="http://www.topitalianscientists.org">www.topitalianscientists.org</a>)</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Meleddu R, Deplano S, Maccioni E, Ortuso F, Cottiglia F, Secci D, Onali A, Sanna E, Angeli A, Angius R, Alcaro S, Supuran CT, Distinto S. Selective inhibition of carbonic anhydrase IX and XII by coumarin and psoralen derivatives. <i>J Enzyme Inhib Med Chem.</i> 2021 Dec;36(1):685-692. doi: 10.1080/14756366.2021.1887171.</li> <li>2. Romeo I, Mesiti F, Lupia A, Alcaro S. Current Updates on Naturally Occurring Compounds Recognizing SARS-CoV-2 Druggable Targets. <i>Molecules.</i> 2021 Jan 26;26(3):632. doi: 10.3390/molecules26030632.</li> <li>3. Mesiti F, Maruca A, Silva V, Rocca R, Fernandes C, Remião F, Uriarte E, Alcaro S, Gaspar A, Borges F. 4-Oxoquinolines and monoamine oxidase: When tautomerism matters. <i>Eur J Med Chem.</i> 2021 Jan 13;213:113183. doi: 10.1016/j.ejmech.2021.113183.</li> <li>4. Spanò V, Barreca M, Rocca R, Bortolozzi R, Bai R, Carbone A, Raimondi MV, Piccionello AP, Montalbano A, Alcaro S, Hamel E, Viola G, Barraja P. Insight on [1,3]thiazolo[4,5-e]isoindoles as tubulin polymerization inhibitors. <i>Eur J Med Chem.</i> 2021 Feb 15;212:113122. doi: 10.1016/j.ejmech.2020.113122.</li> <li>5. Vasconcelos MH, Alcaro S, Arechavala-Gomez V, Baumbach J, Borges F, Brevini TAL, Rivas JL, Devaux Y, Hozak P, Keinänen-Toivola MM, Lattanzi G, Mohr T, Murovska M, Prusty BK, Quinlan RA, Pérez-Sala D, Scheibenbogen C, Schmidt HHHW, Silveira I, Tieri P, Tolios A, Riganti C. Joining European Scientific Forces to Face Pandemics. <i>Trends Microbiol.</i> 2020 Nov 6:S0966-842X(20)30270-5. doi: 10.1016/j.tim.2020.10.008.</li> <li>6. Maruca A, Lupia A, Rocca R, Keszthelyi D, Corsetti M,</li> </ol>

- Alcaro S. In Silico Food-Drug Interaction: A Case Study of Eluxadoline and Fatty Meal. *Int J Mol Sci.* 2020 Nov 30;21(23):9127. doi: 10.3390/ijms21239127.
7. Maruca A, Rocca R, Catalano R, Mesiti F, Costa G, Lanzillotta D, Salatino A, Ortuso F, Trapasso F, Alcaro S, Artese A. Natural Products Extracted from Fungal Species as New Potential Anti-Cancer Drugs: A Structure-Based Drug Repurposing Approach Targeting HDAC7. *Molecules.* 2020 Nov 25;25(23):5524. doi: 10.3390/molecules25235524.
  8. Salpini R, Alkhatib M, Costa G, Piermatteo L, Ambrosio FA, Di Maio VC, Scutari R, Duca L, Berno G, Fabeni L, Alcaro S, Ceccherini-Silberstein F, Artese A, Svicher V. J Key genetic elements, single and in clusters, underlying geographically dependent SARS-CoV-2 genetic adaptation and their impact on binding affinity for drugs and immune control. *Antimicrob Chemother.* 2020 Nov 30;dkaa444. doi: 10.1093/jac/dkaa444.
  9. Artese A, Svicher V, Costa G, Salpini R, Di Maio VC, Alkhatib M, Ambrosio FA, Santoro MM, Assaraf YG, Alcaro S, Ceccherini-Silberstein F. Current status of antivirals and druggable targets of SARS CoV-2 and other human pathogenic coronaviruses. *Drug Resist Updat.* 2020 Aug 26;53:100721. doi: 10.1016/j.drug.2020.100721.
  10. Spanò V, Rocca R, Barreca M, Giallombardo D, Montalbano A, Carbone A, Raimondi MV, Gaudio E, Bortolozzi R, Bai R, Tassone P, Alcaro S, Hamel E, Viola G, Bertoni F, Barraja P. Pyrrolo[2,3':3,4]cyclohepta[1,2-d][1,2]oxazoles, a New Class of Antimitotic Agents Active against Multiple Malignant Cell Types. *J Med Chem.* 2020 Oct 22;63(20):12023-12042. doi: 10.1021/acs.jmedchem.0c01315.
  11. Scumaci D, Olivo E, Fiumara CV, La Chimia M, De Angelis MT, Mauro S, Costa G, Ambrosio FA, Alcaro S, Agosti V, Costanzo FS, Cuda G. DJ-1 Proteoforms in Breast Cancer Cells: The Escape of Metabolic Epigenetic Misregulation. *Cells.* 2020 Aug 26;9(9):1968. doi: 10.3390/cells9091968.
  12. Costa G, Maruca A, Rocca R, Ambrosio FA, Berrino E, Carta F, Mesiti F, Salatino A, Lanzillotta D, Trapasso F, Artese A, Alcaro S, Supuran CT. In Silico Identification and Biological Evaluation of Antioxidant Food Components Endowed with IX and XII hCA Inhibition. *Antioxidants (Basel).* 2020 Aug 21;9(9):775. doi: 10.3390/antiox9090775.
  13. Radadiya A, Zhu W, Coricello A, Alcaro S, Richards NGJ. Improving the Treatment of Acute Lymphoblastic Leukemia. *Biochemistry.* 2020 Sep 8;59(35):3193-3200. doi: 10.1021/acs.biochem.0c00354. Epub 2020 Aug 23.
  14. Coricello A, Mesiti F, Lupia A, Maruca A, Alcaro S. Inside Perspective of the Synthetic and Computational Toolbox of JAK Inhibitors: Recent Updates. *Molecules.* 2020 Jul 22;25(15):3321. doi: 10.3390/molecules25153321.
  15. Grillone K, Riillo C, Scionti F, Rocca R, Tradigo G, Guzzi PH, Alcaro S, Di Martino MT, Tagliaferri P, Tassone P. Non-coding RNAs in cancer: platforms and strategies for investigating the genomic "dark matter". *J Exp Clin Cancer Res.* 2020 Jun 20;39(1):117. doi: 10.1186/s13046-020-01622-x.
  16. Volpe SD, Listro R, Parafioriti M, Di Giacomo M, Rossi D, Ambrosio FA, Costa G, Alcaro S, Ortuso F, Hirsch AKH, Vasile F, Collina S. BOPC1 Enantiomers Preparation and HuR Interaction Study. From Molecular Modeling to a Curious DEEP-STD NMR Application. *ACS Med Chem Lett.* 2020 Jan 28;11(5):883-888. doi: 10.1021/acsmchemlett.9b00659.
  17. Meleddu R, Distinto S, Cottiglia F, Angius R, Caboni P,

- Angeli A, Melis C, Deplano S, Alcaro S, Ortuso F, Supuran CT, Maccioni E. New Dihydrothiazole Benzensulfonamides: Looking for Selectivity toward Carbonic Anhydrase Isoforms I, II, IX, and XII. *ACS Med Chem Lett.* 2020 Feb 13;11(5):852-856. doi: 10.1021/acsmchemlett.9b00644.
18. Maruca A, Lanzillotta D, Rocca R, Lupia A, Costa G, Catalano R, Moraca F, Gaudio E, Ortuso F, Artese A, Trapasso F, Alcaro S. Multi-Targeting Bioactive Compounds Extracted from Essential Oils as Kinase Inhibitors. *Molecules.* 2020 May 6;25(9):2174. doi: 10.3390/molecules25092174.
  19. Bortolami M, Pandolfi F, De Vita D, Carafa C, Messori A, Di Santo R, Feroci M, Costi R, Chiarotto I, Bagetta D, Alcaro S, Colone M, Stringaro A, Scipione L. New deferiprone derivatives as multi-functional cholinesterase inhibitors: design, synthesis and in vitro evaluation. *Eur J Med Chem.* 2020 Jul 15;198:112350. doi: 10.1016/j.ejmech.2020.112350. Epub 2020 Apr 25. PMID: 32380385
  20. Marques CS, López Ó, Bagetta D, Carreiro EP, Petralla S, Bartolini M, Hoffmann M, Alcaro S, Monti B, Bolognesi ML, Decker M, Fernández-Bolaños JG, Burke AJ. N-1,2,3-triazole-isatin derivatives for cholinesterase and  $\beta$ -amyloid aggregation inhibition: A comprehensive bioassay study. *Bioorg Chem.* 2020 May;98:103753. doi: 10.1016/j.bioorg.2020.103753.
  21. Alcaro S, Ortuso F. Multi-target drug discovery: An opportunity for novel and repurposed bioactive compounds. (2020) *Eur J Med Chem.* Feb 25;192:112188. doi: 10.1016/j.ejmech.2020.112188.
  22. Rocca R, Palazzesi F, Amato J, Costa G, Ortuso F, Pagano B, Randazzo A, Novellino E, Alcaro S, Moraca F, Artese A. Folding intermediate states of the parallel human telomeric G-quadruplex DNA explored using Well-Tempered Metadynamics. (2020) *Sci Rep.* Feb 21;10(1):3176. doi: 10.1038/s41598-020-59774-x.
  23. Santoro, A.M., Lanza, V., Bellia, F., Sbardella, D., Tundo, G.R., Cannizzo, A., Grasso, G., Arizzi, M., Nicoletti, V.G., Alcaro, S., Costa, G., Pietropaolo, A., Malgieri, G., D'Ambrosia, G., Fattorusso, R., García-Viñuales, S., Ahmed, I.M.M., Coletta, M., Milardi, D. Pyrazolones Activate the Proteasome by Gating Mechanisms and Protect Neuronal Cells from  $\beta$ -Amyloid Toxicity (2020) *ChemMedChem*, 15(3), pp. 302-316 DOI: 10.1002/cmdc.201900612
  24. Bagetta, D., Maruca, A., Lupia, A., Mesiti, F., Catalano, R., Romeo, I., Moraca, F., Ambrosio, F.A., Costa, G., Artese, A., Ortuso, F., Alcaro, S., Rocca, R. Mediterranean products as promising source of multi-target agents in the treatment of metabolic syndrome (2020) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 186, art. no. 111903, DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.111903
  25. Catalano, R., Rocca, R., Juli, G., Costa, G., Maruca, A., Artese, A., Caracciolo, D., Tagliaferri, P., Alcaro, S., Tassone, P., Amodio, N. A drug repurposing screening reveals a novel epigenetic activity of hydroxychloroquine. (2019) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 183, art. no. 111715, DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.111715
  26. Catalogna, G., Moraca, F., D'Antona, L., Dattilo, V., Perrotti, G., Lupia, A., Costa, G., Ortuso, F., Iuliano, R., Trapasso, F., Amato, R., Alcaro, S., Perrotti, N. Review about the multi-target profile of resveratrol and its implication in the SGK1 inhibition. (2019) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 183, art. no. 111675, DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.111675
  27. Catalano, R., Moraca, F., Amato, J., Cristofari, C., Rigo, R., Via, L.D., Rocca, R., Lupia, A., Maruca, A., Costa, G.,

- Catalanotti, B., Artese, A., Pagano, B., Randazzo, A., Sissi, C., Novellino, E., Alcaro, S. Targeting multiple G-quadruplex-forming DNA sequences: Design, biophysical and biological evaluations of indolo-naphthyridine scaffold derivatives. (2019) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 182, art. no. 111627, DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.111627
28. Esposito, F., Ambrosio, F.A., Maleddu, R., Costa, G., Rocca, R., Maccioni, E., Catalano, R., Romeo, I., Eleftheriou, P., Karia, D.C., Tsirides, P., Godvani, N., Pandya, H., Corona, A., Alcaro, S., Artese, A., Geronikaki, A., Tramontano, E. Chromenone derivatives as a versatile scaffold with dual mode of inhibition of HIV-1 reverse transcriptase-associated Ribonuclease H function and integrase activity. (2019) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 182, art. no. 111617, DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.111617
29. Mesiti, F., Chavarria, D., Gaspar, A., Alcaro, S., Borges, F. The chemistry toolbox of multitarget-directed ligands for Alzheimer's disease. (2019) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 181, art. no. 111572, DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.111572
30. Maruca, A., Catalano, R., Bagetta, D., Mesiti, F., Ambrosio, F.A., Romeo, I., Moraca, F., Rocca, R., Ortuso, F., Artese, A., Costa, G., Alcaro, S., Lupia, A. The Mediterranean Diet as source of bioactive compounds with multi-targeting anti-cancer profile (2019) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 181, art. no. 111579, DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.111579
31. Demurtas, O.C., de Brito Francisco, R., Diretto, G., Ferrante, P., Frusciantè, S., Pietrella, M., Aprea, G., Borghi, L., Feeney, M., Frigerio, L., Coricello, A., Costa, G., Alcaro, S., Martinoia, E., Giuliano, G. ABCC Transporters Mediate the Vacuolar Accumulation of Crocins in Saffron Stigmas (2019) *The Plant cell*, 31 (11), pp. 2789-2804. DOI: 10.1105/tpc.19.00193
32. Costa, G., Carta, F., Ambrosio, F.A., Artese, A., Ortuso, F., Moraca, F., Rocca, R., Romeo, I., Lupia, A., Maruca, A., Bagetta, D., Catalano, R., Vullo, D., Alcaro, S., Supuran, C.T. A computer-assisted discovery of novel potential anti-obesity compounds as selective carbonic anhydrase VA inhibitors (2019) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 181, art. no. 111565, DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.111565
33. Chioua, M., González-Camuñas, A., Catarozzo, M.T., Alcaro, S., Ortuso, F., Yáñez, M., Marco-Contelles, J. Synthesis, Monoamine Oxidase Inhibition and Computational Analysis of Diversely Substituted N-Propargylated-1,3,5-triazines. (2019) *ChemistrySelect*, 4 (28), pp. 8334-8337. DOI: 10.1002/slct.201901271
34. Oliveira, C., Bagetta, D., Cagide, F., Teixeira, J., Amorim, R., Silva, T., Garrido, J., Remião, F., Uriarte, E., Oliveira, P.J., Alcaro, S., Ortuso, F., Borges, F. Benzoic acid-derived nitrones: A new class of potential acetylcholinesterase inhibitors and neuroprotective agents. (2019) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 174, pp. 116-129. DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.04.026
35. Koziolok, M., Alcaro, S., Augustijns, P., Basit, A.W., Grimm, M., Hens, B., Hoad, C.L., Jedamzik, P., Madla, C.M., Maliepaard, M., Marciani, L., Maruca, A., Parrott, N., Pávek, P., Porter, C.J.H., Reppas, C., van Riet-Nales, D., Rubbens, J., Stelova, M., Trevaskis, N.L., Valentová, K., Vertzoni, M., Čepo, D.V., Corsetti, M. The mechanisms of pharmacokinetic food-drug interactions – A perspective from the UNGAP group. (2019) *European Journal of Pharmaceutical Sciences*,



- 134, pp. 31-59. DOI: 10.1016/j.ejps.2019.04.003
36. Maruca, A., Ambrosio, F.A., Lupia, A., Romeo, I., Rocca, R., Moraca, F., Talarico, C., Bagetta, D., Catalano, R., Costa, G., Artese, A., Alcaro, S. Computer-based techniques for lead identification and optimization i: Basics (2019) *Physical Sciences Reviews*, 4 (6), art. no. 20180113, DOI: 10.1515/psr-2018-0113
37. Roleira, F.M.F., Varela, C., Amaral, C., Costa, S.C., Correia-Da-Silva, G., Moraca, F., Costa, G., Alcaro, S., Teixeira, N.A.A., Tavares Da Silva, E.J. C-6 $\alpha$ - vs C-7 $\alpha$ -Substituted Steroidal Aromatase Inhibitors: Which Is Better? Synthesis, Biochemical Evaluation, Docking Studies, and Structure-Activity Relationships. (2019) *Journal of Medicinal Chemistry*, 62 (7), pp. 3636-3657. DOI: 10.1021/acs.jmedchem.9b00157
38. Della Volpe, S., Nasti, R., Queirolo, M., Unver, M.Y., Jumde, V.K., Dömling, A., Vasile, F., Potenza, D., Ambrosio, F.A., Costa, G., Alcaro, S., Zucal, C., Provenzani, A., Di Giacomo, M., Rossi, D., Hirsch, A.K.H., Collina, S. Novel Compounds Targeting the RNA-Binding Protein HuR. Structure-Based Design, Synthesis, and Interaction Studies. (2019) *ACS Medicinal Chemistry Letters*, 10 (4), pp. 615-620. DOI: 10.1021/acsmchemlett.8b00600
39. Alcaro, S., Bolognesi, M.L., García-Sosa, A.T., Rapposelli, S. Editorial: Multi-target-directed ligands (MTDL) as challenging research tools in drug discovery: From design to pharmacological evaluation (2019) *Frontiers in Chemistry*, 7, art. no. 71., DOI: 10.3389/fchem.2019.00071
40. Secci, D., Carradori, S., Petzer, A., Guglielmi, P., D'Ascenzio, M., Chimenti, P., Bagetta, D., Alcaro, S., Zengin, G., Petzer, J.P., Ortuso, F. 4-(3-Nitrophenyl)thiazol-2-ylhydrazone derivatives as antioxidants and selective hMAO-B inhibitors: synthesis, biological activity and computational analysis (2019) *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 34 (1), pp. 597-612., DOI: 10.1080/14756366.2019.1571272
41. Lupia, A., Mimmi, S., Iaccino, E., Maisano, D., Moraca, F., Talarico, C., Vecchio, E., Fiume, G., Ortuso, F., Scala, G., Quinto, I., Alcaro, S. Molecular modelling of epitopes recognized by neoplastic B lymphocytes in Chronic Lymphocytic Leukemia (2019) *European Journal of Medicinal Chemistry*, art. no. 111838, DOI: 10.1016/j.ejmec.2019.111838
42. Distinto, S., Meleddu, R., Ortuso, F., Cottiglia, F., Deplano, S., Sequeira, L., Melis, C., Fois, B., Angeli, A., Capasso, C., Angius, R., Alcaro, S., Supuran, C.T., Maccioni, E. Exploring new structural features of the 4-[(3-methyl-4-aryl-2,3-dihydro-1,3-thiazol-2-ylidene)amino]benzenesulphonamide scaffold for the inhibition of human carbonic anhydrases (2019) *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 34 (1), pp. 1526-1533. DOI: 10.1080/14756366.2019.1654470
43. Guglielmi, P., Secci, D., Petzer, A., Bagetta, D., Chimenti, P., Rotondi, G., Ferrante, C., Recinella, L., Leone, S., Alcaro, S., Zengin, G., Petzer, J.P., Ortuso, F., Carradori, S. Benzo[b]tiophen-3-ol derivatives as effective inhibitors of human monoamine oxidase: design, synthesis, and biological activity (2019) *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 34 (1), pp. 1511-1525. DOI: 10.1080/14756366.2019.1653864
44. Costa, G., Rocca, R., Corona, A., Grandi, N., Moraca, F., Romeo, I., Talarico, C., Gagliardi, M.G., Ambrosio, F.A., Ortuso, F., Alcaro, S., Distinto, S., Maccioni, E., Tramontano, E., Artese, A. Novel natural non-nucleoside inhibitors of HIV-

- 1 reverse transcriptase identified by shape- and structure-based virtual screening techniques (2019) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 161, pp. 1-10., DOI: 10.1016/j.ejmech.2018.10.029
45. Pougá, L., Santoro, M.M., Charpentier, C., Di Carlo, D., Romeo, I., Artese, A., Alcaro, S., Antinori, A., Wirlden, M., Perno, C.F., Ambrosio, F.A., Calvez, V., Descamps, D., Marcelin, A.-G., Ceccherini-Silberstein, F., Lambert-Niclot, S. New resistance mutations to nucleoside reverse transcriptase inhibitors at codon 184 of HIV-1 reverse transcriptase (M184L and M184T) (2019) *Chemical Biology and Drug Design*, 93 (1), pp. 50-59., DOI: 10.1111/cbdd.13378
  46. Vasile, F., Della Volpe, S., Ambrosio, F.A., Costa, G., Unver, M.Y., Zucal, C., Rossi, D., Martino, E., Provenzani, A., Hirsch, A.K.H., Alcaro, S., Potenza, D., Collina, S. Exploration of ligand binding modes towards the identification of compounds targeting HuR: a combined STD-NMR and Molecular Modelling approach (2018) *Scientific Reports*, 8 (1), art. no. 13780, ., DOI: 10.1038/s41598-018-32084-z
  47. Gaudio, E., Paduano, F., Pinton, S., D'Agostino, S., Rocca, R., Costa, G., Ngankeu, A., Aqeilan, R.I., Croce, C.M., Bertoni, F., Alcaro, S., Trapasso, F. TCL1A interacts with TP63 and enhances the survival of Raji Burkitt lymphoma cell line (2018) *British Journal of Haematology*, 183 (3), pp. 509-512., DOI: 10.1111/bjh.14989
  48. Meleddu, R., Distinto, S., Cottiglia, F., Angius, R., Gaspari, M., Taverna, D., Melis, C., Angeli, A., Bianco, G., Deplano, S., Fois, B., Del Prete, S., Capasso, C., Alcaro, S., Ortuso, F., Yanez, M., Supuran, C.T., Maccioni, E. Tuning the Dual Inhibition of Carbonic Anhydrase and Cyclooxygenase by Dihydrothiazole Benzensulfonamides (2018) *ACS Medicinal Chemistry Letters*, 9 (10), pp. 1045-1050., DOI: 10.1021/acsmchemlett.8b00352
  49. Reis, J., Cagide, F., Valencia, M.E., Teixeira, J., Bagetta, D., Pérez, C., Uriarte, E., Oliveira, P.J., Ortuso, F., Alcaro, S., Rodríguez-Franco, M.I., Borges, F. Multi-target-directed ligands for Alzheimer's disease: Discovery of chromone-based monoamine oxidase/cholinesterase inhibitors (2018) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 158, pp. 781-800., DOI: 10.1016/j.ejmech.2018.07.056
  50. Rocca, R., Moraca, F., Costa, G., Talarico, C., Ortuso, F., Da Ros, S., Nicoletto, G., Sissi, C., Alcaro, S., Artese, A. In Silico Identification of PiperidinyI-amine Derivatives as Novel Dual Binders of Oncogene c-myc/c-Kit G-quadruplexes (2018) *ACS Medicinal Chemistry Letters*, 9 (8), pp. 848-853., DOI: 10.1021/acsmchemlett.8b00275
  51. Melis, C., Distinto, S., Bianco, G., Meleddu, R., Cottiglia, F., Fois, B., Taverna, D., Angius, R., Alcaro, S., Ortuso, F., Gaspari, M., Angeli, A., Del Prete, S., Capasso, C., Supuran, C.T., Maccioni, E. Targeting Tumor Associated Carbonic Anhydrases IX and XII: Highly Isozyme Selective Coumarin and Psoralen Inhibitors (2018) *ACS Medicinal Chemistry Letters*, 9 (7), pp. 725-729., DOI: 10.1021/acsmchemlett.8b00170
  52. Marascio, N., Pavia, G., Romeo, I., Talarico, C., Di Salvo, S., Reale, M., Marano, V., Barreca, G.S., Fabiani, F., Perrotti, N., De Siena, M., Giancotti, F., Gravina, T., Alcaro, S., Artese, A., Torti, C., Liberto, M.C., Focà, A. Real-life 3D therapy failure: Analysis of NS5A 93H RAS plus 108 K polymorphism in complex with ombitasvir by molecular modeling (2018) *Journal of Medical Virology*, 90 (7), pp. 1257-1263., DOI: 10.1002/jmv.25073

53. Romeo, I., Marascio, N., Pavia, G., Talarico, C., Costa, G., Alcaro, S., Artese, A., Torti, C., Liberto, M.C., Focà, A. Structural Modeling of New Polymorphism Clusters of HCV Polymerase Isolated from Direct-Acting Antiviral Naïve Patients: Focus on Dasabuvir and Setrobuvir Binding Affinity (2018) *ChemistrySelect*, 3 (21), pp. 6009-6017., DOI: 10.1002/slct.201800649
54. Malet, I., Ambrosio, F.A., Subra, F., Herrmann, B., Leh, H., Bouger, M.-C., Artese, A., Katlama, C., Talarico, C., Romeo, I., Alcaro, S., Costa, G., Deprez, E., Calvez, V., Marcelin, A.-G., Delelis, O. Pathway involving the N155H mutation in HIV-1 integrase leads to dolutegravir resistance (2018) *Journal of Antimicrobial Chemotherapy*, 73 (5), pp. 1158-1166., DOI: 10.1093/jac/dkx529
55. Molinaro, R., Evangelopoulos, M., Hoffman, J.R., Corbo, C., Taraballi, F., Martinez, J.O., Hartman, K.A., Cosco, D., Costa, G., Romeo, I., Sherman, M., Paolino, D., Alcaro, S., Tasciotti, E. Design and Development of Biomimetic Nanovesicles Using a Microfluidic Approach (2018) *Advanced Materials*, 30 (15), art. no. 1702749, ., DOI: 10.1002/adma.201702749
56. Ortuso, F., Bagetta, D., Maruca, A., Talarico, C., Bolognesi, M.L., Haider, N., Borges, F., Bryant, S., Langer, T., Senderowitz, H., Alcaro, S. The Mu.Ta.Lig. Chemotheca: A community-populated molecular database for multi-target ligands identification and compound-repurposing (2018) *Frontiers in Chemistry*, 6 (APR), art. no. 130, ., DOI: 10.3389/fchem.2018.00130
57. Carradori, S., Ortuso, F., Petzer, A., Bagetta, D., De Monte, C., Secci, D., De Vita, D., Guglielmi, P., Zengin, G., Aktumsek, A., Alcaro, S., Petzer, J.P. Design, synthesis and biochemical evaluation of novel multi-target inhibitors as potential anti-Parkinson agents (2018) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 143, pp. 1543-1552., DOI: 10.1016/j.ejmech.2017.10.050
58. Corigliano, D.M., Syed, R., Messineo, S., Lupia, A., Patel, R., Reddy, C.V.R., Dubey, P.K., Colica, C., Amato, R., De Sarro, G., Alcaro, S., Indrasena, A., Brunetti, A. Indole and 2,4-Thiazolidinedione conjugates as potential anticancer modulators (2018) *PeerJ*, 2018 (8), art. no. e5386, ., DOI: 10.7717/peerj.5386
59. Koch, P., Brunschweiler, A., Namasivayam, V., Ullrich, S., Maruca, A., Lazzaretto, B., Küppers, P., Hinz, S., Hockemeyer, J., Wiese, M., Heer, J., Alcaro, S., Kiec-Kononowicz, K., Müller, C.E. Probing substituents in the 1- and 3-position: Tetrahydropyrazino-annelated water-soluble xanthine derivatives as multi-target drugs with potent adenosine receptor antagonistic activity (2018) *Frontiers in Chemistry*, 6 (JUN), art. no. 206, ., DOI: 10.3389/fchem.2018.00206
60. Rocca, R., Talarico, C., Moraca, F., Costa, G., Romeo, I., Ortuso, F., Alcaro, S., Artese, A. Molecular recognition of a carboxy pyridostatin toward G-quadruplex structures: Why does it prefer RNA? (2017) *Chemical Biology and Drug Design*, 90 (5), pp. 919-925., DOI: 10.1111/cbdd.13015
61. Maruca, A., Moraca, F., Rocca, R., Molisani, F., Alcaro, F., Gidaro, M.C., Alcaro, S., Costa, G., Ortuso, F. Chemoinformatic database building and in silico hit-identification of potential multi-targeting bioactive compounds extracted from mushroom species (2017) *Molecules*, 22 (9), art. no. 1571, ., DOI: 10.3390/molecules22091571
62. Fonseca, A., Reis, J., Silva, T., Matos, M.J., Bagetta, D., Ortuso, F., Alcaro, S., Uriarte, E., Borges, F. Coumarin versus

- Chromone Monoamine Oxidase B Inhibitors: Quo Vadis? (2017) *Journal of Medicinal Chemistry*, 60 (16), pp. 7206-7212., DOI: 10.1021/acs.jmedchem.7b00918
63. Bianco, G., Meleddu, R., Distinto, S., Cottiglia, F., Gaspari, M., Melis, C., Corona, A., Angius, R., Angeli, A., Taverna, D., Alcaro, S., Leitans, J., Kazaks, A., Tars, K., Supuran, C.T., Maccioni, E. N-Acylbenzenesulfonamide Dihydro-1,3,4-oxadiazole Hybrids: Seeking Selectivity toward Carbonic Anhydrase Isoforms (2017) *ACS Medicinal Chemistry Letters*, 8 (8), pp. 792-796., DOI: 10.1021/acsmedchemlett.7b00205
64. Rocca, R., Moraca, F., Costa, G., Nadai, M., Scalabrin, M., Talarico, C., Distinto, S., Maccioni, E., Ortuso, F., Artese, A., Alcaro, S., Richter, S.N. Identification of G-quadruplex DNA/RNA binders: Structure-based virtual screening and biophysical characterization (2017) *Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects*, 1861 (5), pp. 1329-1340., DOI: 10.1016/j.bbagen.2016.12.023
65. Moraca, F., Amato, J., Ortuso, F., Artese, A., Pagano, B., Novellino, E., Alcaro, S., Parrinello, M., Limongelli, V. Ligand binding to telomeric G-quadruplex DNA investigated by funnel-metadynamics simulations (2017) *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 114 (11), pp. E2136-E2145., DOI: 10.1073/pnas.1612627114
66. Corona, A., Onnis, V., Deplano, A., Bianco, G., Demurtas, M., Distinto, S., Cheng, Y.-C., Alcaro, S., Esposito, F., Tramontano, E. Design, synthesis and antiviral evaluation of novel heteroarylcarbothioamide derivatives as dual inhibitors of HIV-1 reverse transcriptase-associated RNase H and RDDP functions (2017) *Pathogens and Disease*, 75 (6), art. no. ftx078, ., DOI: 10.1093/femspd/ftx078
67. Sonar, V.P., Corona, A., Distinto, S., Maccioni, E., Meleddu, R., Fois, B., Floris, C., Malpure, N.V., Alcaro, S., Tramontano, E., Cottiglia, F. Natural product-inspired esters and amides of ferulic and caffeic acid as dual inhibitors of HIV-1 reverse transcriptase (2017) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 130, pp. 248-260., DOI: 10.1016/j.ejmech.2017.02.054
68. Meleddu, R., Distinto, S., Cirilli, R., Alcaro, S., Yanez, M., Sanna, M.L., Corona, A., Melis, C., Bianco, G., Matyus, P., Cottiglia, F., Maccioni, E. Through scaffold modification to 3,5-diaryl-4,5-dihydroisoxazoles: new potent and selective inhibitors of monoamine oxidase B (2017) *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 32 (1), pp. 264-270., DOI: 10.1080/14756366.2016.1247061
69. Milelli, A., Marchetti, C., Greco, M.L., Moraca, F., Costa, G., Turrini, E., Catanzaro, E., Betari, N., Calcabrini, C., Sissi, C., Alcaro, S., Fimognari, C., Tumiatti, V., Minarini, A. Naphthalene diimide-polyamine hybrids as antiproliferative agents: Focus on the architecture of the polyamine chains (2017) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 128, pp. 107-122., DOI: 10.1016/j.ejmech.2017.01.025
70. Alteri, C., Surdo, M., Di Maio, V.C., Di Santo, F., Costa, G., Parrotta, L., Romeo, I., Gori, C., Santoro, M.M., Fedele, V., Carta, S., Continenza, F., Pinnetti, C., Bellagamba, R., Liuzzi, G., Orchi, N., Latini, A., Bertoli, A., Girardi, E., Alcaro, S., Giuliani, M., Petrosillo, N., Andreoni, M., Antinori, A., Monforte, A.D., Ceccherini-Silberstein, F., Artese, A., Perno, C.F., Svicher, V. The HIV-1 reverse transcriptase polymorphism A98S improves the response to tenofovir disoproxil fumarate + emtricitabine-containing HAART both in vivo and in vitro (2016) *Journal of Global Antimicrobial Resistance*, 7, pp. 1-7., DOI: 10.1016/j.jgar.2016.06.005

71. Carradori, S., Gidaro, M.C., Petzer, A., Costa, G., Guglielmi, P., Chimenti, P., Alcaro, S., Petzer, J.P. Inhibition of Human Monoamine Oxidase: Biological and Molecular Modeling Studies on Selected Natural Flavonoids (2016) *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 64 (47), pp. 9004-9011., DOI: 10.1021/acs.jafc.6b03529
72. Gidaro, M.C., Alcaro, S., Secci, D., Rivanera, D., Mollica, A., Agamennone, M., Giampietro, L., Carradori, S. Identification of new anti-Candida compounds by ligand-based pharmacophore virtual screening (2016) *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 31 (6), pp. 1703-1706., DOI: 10.3109/14756366.2016.1156103
73. Talarico, C., Dattilo, V., D'Antona, L., Menniti, M., Bianco, C., Ortuso, F., Alcaro, S., Schenone, S., Perrotti, N., Amato, R. SGK1, the New Player in the Game of Resistance: Chemo-Radio Molecular Target and Strategy for Inhibition (2016) *Cellular Physiology and Biochemistry*, 39 (5), pp. 1863-1876., DOI: 10.1159/000447885
74. Costa, G., Rocca, R., Moraca, F., Talarico, C., Romeo, I., Ortuso, F., Alcaro, S., Artese, A. A Comparative Docking Strategy to Identify Polyphenolic Derivatives as Promising Antineoplastic Binders of G-quadruplex DNA c-myc and bcl-2 Sequences (2016) *Molecular Informatics*, pp. 391-402., DOI: 10.1002/minf.201501040
75. Desideri, N., Proietti Monaco, L., Fioravanti, R., Biava, M., Yáñez, M., Alcaro, S., Ortuso, F. (E)-3-Heteroarylidenechroman-4-ones as potent and selective monoamine oxidase-B inhibitors (2016) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 117, pp. 292-300., DOI: 10.1016/j.ejmech.2016.03.081
76. Costa, G., Gidaro, M.C., Vullo, D., Supuran, C.T., Alcaro, S. Active components of essential oils as anti-obesity potential drugs investigated by in silico techniques (2016) *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 64 (26), pp. 5295-5300., DOI: 10.1021/acs.jafc.6b02004
77. Reis, J., Cagide, F., Chavarria, D., Silva, T., Fernandes, C., Gaspar, A., Uriarte, E., Remião, F., Alcaro, S., Ortuso, F., Borges, F. Discovery of New Chemical Entities for Old Targets: Insights on the Lead Optimization of Chromone-Based Monoamine Oxidase B (MAO-B) Inhibitors (2016) *Journal of Medicinal Chemistry*, 59 (12), pp. 5879-5893., DOI: 10.1021/acs.jmedchem.6b00527
78. Varela, C.L., Amaral, C., Correia-Da-Silva, G., Costa, S.C., Carvalho, R.A., Costa, G., Alcaro, S., Teixeira, N.A.A., Tavares-Da-Silva, E.J., Roleira, F.M.F. Exploring new chemical functionalities to improve aromatase inhibition of steroids (2016) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 24 (12), pp. 2823-2831., DOI: 10.1016/j.bmc.2016.04.056
79. Aiello, F., Badolato, M., Pessina, F., Sticozzi, C., Maestrini, V., Aldinucci, C., Luongo, L., Guida, F., Ligresti, A., Artese, A., Allarà, M., Costa, G., Frosini, M., Schiano Moriello, A., De Petrocellis, L., Valacchi, G., Alcaro, S., Maione, S., Di Marzo, V., Corelli, F., Brizzi, A. Design and Synthesis of New Transient Receptor Potential Vanilloid Type-1 (TRPV1) Channel Modulators: Identification, Molecular Modeling Analysis, and Pharmacological Characterization of the N-(4-Hydroxy-3-methoxybenzyl)-4-(thiophen-2-yl)butanamide, a Small Molecule Endowed with Agonist TRPV1 Activity and Protective Effects against Oxidative Stress (2016) *ACS Chemical Neuroscience*, 7 (6), pp. 737-748., DOI: 10.1021/acschemneuro.5b00333
80. Gaudio, E., Paduano, F., Ngankeu, A., Ortuso, F., Lovat, F.,

- Pinton, S., D'Agostino, S., Zanasi, N., Aqeilan, R.I., Campiglia, P., Novellino, E., Alcaro, S., Croce, C.M., Trapasso, F. A Fhit-mimetic peptide suppresses annexin A4-mediated chemoresistance to paclitaxel in lung cancer cells (2016) *Oncotarget*, 7 (21), pp. 29927-29936., DOI: 10.18632/oncotarget.9179
81. Talarico, C., Dattilo, V., Lucia D'Antona, Barone, A., Amodio, N., Belviso, S., Musumeci, F., Abbruzzese, C., Bianco, C., Trapasso, F., Schenone, S., Alcaro, S., Ortuso, F., Florio, T., Paggi, M.G., Perrotti, N., Amato, R. SII13, a SGK1 inhibitor, potentiates the effects of radiotherapy, modulates the response to oxidative stress and induces cytotoxic autophagy in human glioblastoma multiforme cells (2016) *Oncotarget*, 7 (13), pp. 15868-15884., DOI: 10.18632/oncotarget.7520
  82. Kaserer, T., Rigo, R., Schuster, P., Alcaro, S., Sissi, C., Schuster, D. Optimized Virtual Screening Workflow for the Identification of Novel G-Quadruplex Ligands (2016) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 56 (3), pp. 484-500., DOI: 10.1021/acs.jcim.5b00658
  83. Gidaro, M.C., Astorino, C., Petzer, A., Carradori, S., Alcaro, F., Costa, G., Artese, A., Rafele, G., Russo, F.M., Petzer, J.P., Alcaro, S. Kaempferol as Selective Human MAO-A Inhibitor: Analytical Detection in Calabrian Red Wines, Biological and Molecular Modeling Studies (2016) *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 64 (6), pp. 1394-1400., DOI: 10.1021/acs.jafc.5b06043
  84. Distinto, S., Meleddu, R., Yanez, M., Cirilli, R., Bianco, G., Sanna, M.L., Arridu, A., Cossu, P., Cottiglia, F., Faggi, C., Ortuso, F., Alcaro, S., Maccioni, E. Drug design, synthesis, in vitro and in silico evaluation of selective monoaminoxidase B inhibitors based on 3-acetyl-2-dichlorophenyl-5-aryl-2,3-dihydro-1,3,4-oxadiazole chemical scaffold (2016) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 108, pp. 542-552., DOI: 10.1016/j.ejmech.2015.12.026
  85. Doria, F., Nadai, M., Costa, G., Sattin, G., Gallati, C., Bergamaschi, G., Moraca, F., Alcaro, S., Freccero, M., Richter, S.N. Extended Naphthalene Diimides with Donor/Acceptor Hydrogen-Bonding Properties Targeting G-Quadruplex Nucleic Acids (2016) *European Journal of Organic Chemistry*, 2016 (28), pp. 4824-4833., DOI: 10.1002/ejoc.201600757
  86. Corona, A., Meleddu, R., Esposito, F., Distinto, S., Bianco, G., Masaoka, T., Maccioni, E., Menéndez-Arias, L., Alcaro, S., Le Grice, S.F.J., Tramontano, E. Ribonuclease H/DNA polymerase HIV-1 reverse transcriptase dual inhibitor: Mechanistic studies on the allosteric mode of action of isatin-based compound RMNC6 (2016) *PLoS ONE*, 11 (1), art. no. e0147225, ., DOI: 10.1371/journal.pone.0147225
  87. Rocca, R., Costa, G., Artese, A., Parrotta, L., Ortuso, F., Maccioni, E., Pinato, O., Greco, M.L., Sissi, C., Alcaro, S., Distinto, S., Moraca, F. Back Cover: Hit Identification of a Novel Dual Binder for h-telo/c-myc G-Quadruplex by a Combination of Pharmacophore Structure-Based Virtual Screening and Docking Refinement (*ChemMedChem* 16/2016) (2016) *ChemMedChem*, 11 (16), p. 1875., DOI: 10.1002/cmdc.201600393
  88. Rocca, R., Costa, G., Artese, A., Parrotta, L., Ortuso, F., Maccioni, E., Pinato, O., Greco, M.L., Sissi, C., Alcaro, S., Distinto, S., Moraca, F. Hit Identification of a Novel Dual Binder for h-telo/c-myc G-Quadruplex by a Combination of Pharmacophore Structure-Based Virtual Screening and Docking Refinement (2016) *ChemMedChem*, pp. 1721-1733.,

- DOI: 10.1002/cmdc.201600053
89. D'Ascenzio, M., Chimenti, P., Gidaro, M.C., De Monte, C., De Vita, D., Granese, A., Scipione, L., Di Santo, R., Costa, G., Alcaro, S., Yáñez, M., Carradori, S. (Thiazol-2-yl)hydrazone derivatives from acetylpyridines as dual inhibitors of MAO and AChE: Synthesis, biological evaluation and molecular modeling studies (2015) *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 30 (6), pp. 908-919., DOI: 10.3109/14756366.2014.987138
  90. Spyraakis, F., Benedetti, P., Decherchi, S., Rocchia, W., Cavalli, A., Alcaro, S., Ortuso, F., Baroni, M., Cruciani, G. A Pipeline to Enhance Ligand Virtual Screening: Integrating Molecular Dynamics and Fingerprints for Ligand and Proteins (2015) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 55 (10), pp. 2256-2274., DOI: 10.1021/acs.jcim.5b00169
  91. Roleira, F.M.F., Da Silva, E.J.T., Pereira, J.A.C., Ortuso, F., Alcaro, S., Pinto, M.M.M. Molecular clefts of Rebek revisited: Potential application as drug carriers for the antiviral acyclovir (2015) *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*, 83 (1-2), pp. 203-208., DOI: 10.1007/s10847-015-0554-3
  92. Alteri, C., Surdo, M., Bellocchi, M.C., Saccomandi, P., Continenza, F., Armenia, D., Parrotta, L., Carioti, L., Costa, G., Fourati, S., Di Santo, F., Scutari, R., Barbaliscia, S., Fedele, V., Carta, S., Balestra, E., Alcaro, S., Marcelin, A.G., Calvez, V., Ceccherini-Silberstein, F., Artese, A., Perno, C.F., Svicher, V. Incomplete APOBEC3G/F neutralization by HIV-1 Vif mutants facilitates the genetic evolution from CCR5 to CXCR4 usage (2015) *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, 59 (8), pp. 4870-4881., DOI: 10.1128/AAC.00137-15
  93. Meleddu, R., Maccioni, E., Distinto, S., Bianco, G., Melis, C., Alcaro, S., Cottiglia, F., Ceruso, M., Supuran, C.T. New 4-[(3-cyclohexyl-4-aryl-2,3-dihydro-1,3-thiazol-2-ylidene)amino]benzene-1-sulfonamides, synthesis and inhibitory activity toward carbonic anhydrase I, II, IX, XII (2015) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 25 (16), art. no. 22766, pp. 3281-3284., DOI: 10.1016/j.bmcl.2015.05.076
  94. D'Antona, L., Amato, R., Talarico, C., Ortuso, F., Menniti, M., Dattilo, V., Iuliano, R., Gigliotti, F., Artese, A., Costa, G., Schenone, S., Musumeci, F., Abbruzzese, C., Botta, L., Trapasso, F., Alcaro, S., Paggi, M.G., Perrotti, N. SII13, a specific inhibitor of the Sgk1 kinase activity that counteracts cancer cell proliferation (2015) *Cellular Physiology and Biochemistry*, 35 (5), pp. 2006-2018., DOI: 10.1159/000374008
  95. Gidaro, M.C., Alcaro, F., Carradori, S., Costa, G., Vullo, D., Supuran, C.T., Alcaro, S. Eriocitrin and apigenin as new carbonic anhydrase VA inhibitors from a virtual screening of calabrian natural products (2015) *Planta Medica*, 81 (6), pp. 533-540., DOI: 10.1055/s-0034-1396139
  96. Meleddu, R., Distinto, S., Corona, A., Bianco, G., Cannas, V., Esposito, F., Artese, A., Alcaro, S., Matyus, P., Bogdan, D., Cottiglia, F., Tramontano, E., Maccioni, E. (3Z)-3-(2-[4-(aryl)-1,3-thiazol-2-yl]hydrazin-1-ylidene)-2,3-dihydro-1H-indol-2-one derivatives as dual inhibitors of HIV-1 reverse transcriptase (2015) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 93, pp. 452-460., DOI: 10.1016/j.ejmech.2015.02.032
  97. De Monte, C., Bizzarri, B., Gidaro, M.C., Carradori, S., Mollica, A., Luisi, G., Granese, A., Alcaro, S., Costa, G., Basilico, N., Parapini, S., Scaltrito, M.M., Masia, C., Sisto, F.

- Bioactive compounds of *Crocus sativus* L. and their semi-synthetic derivatives as promising anti-*Helicobacter pylori*, anti-malarial and anti-leishmanial agents (2015) *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 30 (6), pp. 1027-1033., DOI: 10.3109/14756366.2014.1001755
98. Ruiu, S., Anzani, N., Orrü, A., Floris, C., Caboni, P., Alcaro, S., MacCioni, E., Distinto, S., Cottiglia, F. Methoxyflavones from *Stachys glutinosa* with binding affinity to opioid receptors: In silico, in vitro, and in vivo studies (2015) *Journal of Natural Products*, 78 (1), pp. 69-76., DOI: 10.1021/np500671v
99. Rocca, R., Moraca, F., Costa, G., Alcaro, S., Distinto, S., Maccioni, E., Ortuso, F., Artese, A., Parrotta, L. Structure-based virtual screening of novel natural alkaloid derivatives as potential binders of h-telo and c-myc DNA G-quadruplex conformations (2015) *Molecules*, 20 (1), pp. 206-223., DOI: 10.3390/molecules20010206
100. Marchetti, C., Minarini, A., Tumiatti, V., Moraca, F., Parrotta, L., Alcaro, S., Rigo, R., Sissi, C., Gunaratnam, M., Ohnmacht, S.A., Neidle, S., Milelli, A. Macrocyclic naphthalene diimides as G-quadruplex binders (2015) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 23 (13), pp. 3819-3830., DOI: 10.1016/j.bmc.2015.03.076
101. Talarico, C., D'Antona, L., Scumaci, D., Barone, A., Gigliotti, F., Fiumara, C.V., Dattilo, V., Gallo, E., Visca, P., Ortuso, F., Abbruzzese, C., Botta, L., Schenone, S., Cuda, G., Alcaro, S., Bianco, C., Lavia, P., Paggi, M.G., Perrotti, N., Amato, R. Preclinical model in HCC: The SGK1 kinase inhibitor S1113 blocks tumor progression in vitro and in vivo and synergizes with radiotherapy (2015) *Oncotarget*, 6 (35), pp. 37511-37525., DOI: 10.18632/oncotarget.5527
102. Surdo, M., Alteri, C., Puertas, M.C., Saccomandi, P., Parrotta, L., Swenson, L., Chapman, D., Costa, G., Artese, A., Balestra, E., Aquaro, S., Alcaro, S., Lewis, M., Clotet, B., Harrigan, R., Valdez, H., Svicher, V., Perno, C.F., Martinez-Picado, J., Ceccherini-Silberstein, F. Effect of maraviroc on non-R5 tropic HIV-1: Refined analysis of subjects from the phase IIb study A4001029 (2015) *Clinical Microbiology and Infection*, 21 (1), pp. 103.e1-103.e6., DOI: 10.1016/j.cmi.2014.08.002
103. Bautista-Aguilera, O.M., Samadi, A., Chioua, M., Nikolic, K., Filipic, S., Agbaba, D., Soriano, E., De Andrés, L., Rodríguez-Franco, M.I., Alcaro, S., Ramsay, R.R., Ortuso, F., Yañez, M., Marco-Contelles, J. N-methyl-N-((1-methyl-5-(3-(1-(2-methylbenzyl)piperidin-4-yl)propoxy)-1H-indol-2-yl)methyl)prop-2-yn-1-amine, a new cholinesterase and monoamine oxidase dual inhibitor (2014) *Journal of Medicinal Chemistry*, 57 (24), pp. 10455-10463., DOI: 10.1021/jm501501a
104. Ortuso, F., Amato, R., Artese, A., Dantona, L., Costa, G., Talarico, C., Gigliotti, F., Bianco, C., Trapasso, F., Schenone, S., Musumeci, F., Botta, L., Perrotti, N., Alcaro, S. In silico identification and biological evaluation of novel selective serum/glucocorticoid-inducible kinase 1 inhibitors based on the pyrazolo-pyrimidine scaffold (2014) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 54 (7), pp. 1828-1832., DOI: 10.1021/ci500235f
105. De Monte, C., Carradori, S., Chimenti, P., Secci, D., Mannina, L., Alcaro, F., Petzer, A., N'Da, C.I., Gidaro, M.C., Costa, G., Alcaro, S., Petzer, J.P. New insights into the biological properties of *Crocus sativus* L.: Chemical modifications, human monoamine oxidases inhibition and molecular modeling studies (2014) *European Journal of Medicinal*



- Chemistry, 82, pp. 164-171., DOI: 10.1016/j.ejmech.2014.05.048
106. Percivalle, C., Sissi, C., Greco, M.L., Musetti, C., Mariani, A., Artese, A., Costa, G., Perrone, M.L., Alcaro, S., Freccero, M. Aryl ethynyl anthraquinones: A useful platform for targeting telomeric G-quadruplex structures (2014) *Organic and Biomolecular Chemistry*, 12 (22), pp. 3744-3754., DOI: 10.1039/c4ob00220b
  107. D'Ascenzio, M., Carradori, S., Secci, D., Mannina, L., Sobolev, A.P., De Monte, C., Cirilli, R., Yáñez, M., Alcaro, S., Ortuso, F. Identification of the stereochemical requirements in the 4-aryl-2-cycloalkylidenhydrazinylthiazole scaffold for the design of selective human monoamine oxidase B inhibitors (2014) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 22 (10), pp. 2887-2895., DOI: 10.1016/j.bmc.2014.03.042
  108. Ortuso, F., Alcaro, S., Menta, S., Fioravanti, R., Cirilli, R. A chromatographic and computational study on the driving force operating in the exceptionally large enantioseparation of N-thiocarbamoyl-3-(4'-biphenyl)-5-phenyl-4,5-dihydro-(1H) pyrazole on a 4-methylbenzoate cellulose-based chiral stationary phase (2014) *Journal of Chromatography A*, 1324, pp. 71-77., DOI: 10.1016/j.chroma.2013.11.020
  109. Parrotta, L., Ortuso, F., Moraca, F., Rocca, R., Costa, G., Alcaro, S., Artese, A. Targeting unimolecular G-quadruplex nucleic acids: A new paradigm for the drug discovery? (2014) *Expert Opinion on Drug Discovery*, 9 (10), pp. 1167-1187., DOI: 10.1517/17460441.2014.941353
  110. Di Maio, V.C., Cento, V., Mirabelli, C., Artese, A., Costa, G., Alcaro, B.S., Perno, C.F., Ceccherini-Silberstein, F. Hepatitis c virus genetic variability and the presence of ns5b resistance-Associated mutations as natural polymorphisms in selected genotypes could affect the response to ns5b inhibitors (2014) *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, 58 (5), pp. 2781-2797., DOI: 10.1128/AAC.02386-13
  111. Malet, I., Arriaga, L.G., Artese, A., Costa, G., Parrotta, L., Alcaro, S., Delelis, O., Tmeizeh, A., Katlama, C., Valantin, M.-A., Ceccherini-Silberstein, F., Calvez, V., Marcelin, A.-G. New raltegravir resistance pathways induce broad cross-resistance to all currently used integrase inhibitors (2014) *Journal of Antimicrobial Chemotherapy*, 69 (8), art. no. dku095, pp. 2118-2122., DOI: 10.1093/jac/dku095
  112. Meleddu, R., Cannas, V., Distinto, S., Sarais, G., Del Vecchio, C., Esposito, F., Bianco, G., Corona, A., Cottiglia, F., Alcaro, S., Parolin, C., Artese, A., Scalise, D., Fresta, M., Arridu, A., Ortuso, F., Maccioni, E., Tramontano, E. Design, synthesis, and biological evaluation of 1,3-diarylpropenones as dual inhibitors of HIV-1 reverse transcriptase (2014) *ChemMedChem*, 9 (8), pp. 1869-1879., DOI: 10.1002/cmdc.201402015
  113. Sattin, G., Artese, A., Nadai, M., Costa, G., Parrotta, L., Alcaro, S., Palumbo, M., Richter, S.N. Conformation and stability of intramolecular telomeric G-quadruplexes: Sequence effects in the loops (2013) *PLoS ONE*, 8 (12), art. no. e84113, ., DOI: 10.1371/journal.pone.0084113
  114. Ruiu, S., Anzani, N., Orrù, A., Floris, C., Caboni, P., Maccioni, E., Distinto, S., Alcaro, S., Cottiglia, F. N-Alkyl dien- and trienamides from the roots of *Otanthus maritimus* with binding affinity for opioid and cannabinoid receptors (2013) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 21 (22), pp. 7074-7082., DOI: 10.1016/j.bmc.2013.09.017
  115. Gaudio, E., Paduano, F., Spizzo, R., Ngankeu, A., Zanesi, N., Gaspari, M., Ortuso, F., Lovat, F., Rock, J., Hill, G.A., Kaou,

- M., Cuda, G., Aqeilan, R.I., Alcaro, S., Croce, C.M., Trapasso, F. Fhit delocalizes Annexin A4 from plasma membrane to cytosol and sensitizes lung cancer cells to paclitaxel (2013) *PLoS ONE*, 8 (11), art. no. e78610, DOI: 10.1371/journal.pone.0078610
116. Artese, A., Cross, S., Costa, G., Distinto, S., Parrotta, L., Alcaro, S., Ortuso, F., Cruciani, G. Molecular interaction fields in drug discovery: Recent advances and future perspectives (2013) *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 3 (6), pp. 594-613., DOI: 10.1002/wcms.1150
  117. Artese, A., Costa, G., Ortuso, F., Parrotta, L., Alcaro, S. Identification of new natural DNA G-quadruplex binders selected by a structure-based virtual screening approach (2013) *Molecules*, 18 (10), pp. 12051-12070., DOI: 10.3390/molecules181012051
  118. Fourati, S., Visseaux, B., Armenia, D., Morand-Joubert, L., Artese, A., Charpentier, C., Eede, P.V.D., Costa, G., Alcaro, S., Wirden, M., Perno, C.F., Silberstein, F.C., Descamps, D., Calvez, V., Marcelin, A.G. Identification of a rare mutation at reverse transcriptase Lys65 (K65E) in HIV-1-infected patients failing on nucleos(t)ide reverse transcriptase inhibitors (2013) *Journal of Antimicrobial Chemotherapy*, 68 (10), art. no. dkt200, pp. 2199-2204., DOI: 10.1093/jac/dkt200
  119. Alteri, C., Artese, A., Beheydt, G., Santoro, M.M., Costa, G., Parrotta, L., Bertoli, A., Gori, C., Orchi, N., Girardi, E., Antinori, A., Alcaro, S., Monforte, A.D., Theys, K., Vandamme, A.-M., Ceccherini-Silberstein, F., Svicher, V., Perno, C.F. Structural modifications induced by specific HIV-1 protease-compensatory mutations have an impact on the virological response to a first-line lopinavir/ritonavir-containing regimen (2013) *Journal of Antimicrobial Chemotherapy*, 68 (10), art. no. dkt173, pp. 2203-2209., DOI: 10.1093/jac/dkt173
  120. Ortuso, F., Paduano, F., Carotenuto, A., Gomez-Monterrey, I., Bilotta, A., Gaudio, E., Sala, M., Artese, A., Vernieri, E., Dattilo, V., Iuliano, R., Brancaccio, D., Bertamini, A., Musella, S., Alcaro, S., Grieco, P., Perrotti, N., Croce, C.M., Novellino, E., Fusco, A., Campiglia, P., Trapasso, F. Discovery of PTPRJ agonist peptides that effectively inhibit in vitro cancer cell proliferation and tube formation (2013) *ACS Chemical Biology*, 8 (7), pp. 1497-1506., DOI: 10.1021/cb3007192
  121. Artese, A., Alcaro, S., Moraca, F., Reina, R., Ventura, M., Costantino, G., Beccari, A.R., Ortuso, F. State-of-the-art and dissemination of computational tools for drug-design purposes: A survey among Italian academics and industrial institutions (2013) *Future Medicinal Chemistry*, 5 (8), pp. 907-927., DOI: 10.4155/fmc.13.59
  122. Distinto, S., Maccioni, E., Meleddu, R., Corona, A., Alcaro, S., Tramontano, E. Molecular aspects of the RT/drug interactions. Perspective of dual inhibitors (2013) *Current Pharmaceutical Design*, 19 (10), pp. 1850-1859., DOI: 10.2174/1381612811319100009
  123. Cross, S., Baroni, M., Ortuso, F., Alcaro, S., Cruciani, G. Disrupting protein-protein interfaces using GRID Molecular Interaction Fields (2013) *Disruption of Protein-Protein Interfaces: In Search of New Inhibitors*, 9783642379994, pp. 61-82., DOI: 10.1007/978-3-642-37999-4\_3
  124. Chen, M., Svicher, V., Artese, A., Costa, G., Alteri, C., Ortuso, F., Parrotta, L., Liu, Y., Liu, C., Perno, C.F., Alcaro, S., Zhang, J. Detecting and understanding genetic and structural

- features in HIV-1 B subtype V3 underlying HIV-1 co-receptor usage (2013) *Bioinformatics*, 29 (4), pp. 451-460., DOI: 10.1093/bioinformatics/btt002
125. Alcaro, S., Musetti, C., Distinto, S., Casatti, M., Zagotto, G., Artese, A., Parrotta, L., Moraca, F., Costa, G., Ortuso, F., MacCioni, E., Sissi, C. Identification and characterization of new DNA G- quadruplex binders selected by a combination of ligand and structure-based virtual screening approaches (2013) *Journal of Medicinal Chemistry*, 56 (3), pp. 843-855., DOI: 10.1021/jm3013486
  126. Alcaro, S., Chiodo, S.G., Leopoldini, M., Ortuso, F. Antioxidant efficiency of oxovitisin, a new class of red wine pyranoanthocyanins, revealed through quantum mechanical investigations (2013) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 53 (1), pp. 66-75., DOI: 10.1021/ci300354s
  127. Artese, A., Costa, G., Distinto, S., Moraca, F., Ortuso, F., Parrotta, L., Alcaro, S. Toward the design of new DNA G- quadruplex ligands through rational analysis of polymorphism and binding data (2013) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 68, pp. 139-149., DOI: 10.1016/j.ejmech.2013.07.022
  128. Desideri, N., Fioravanti, R., Proietti Monaco, L., Biava, M., Yáñez, M., Ortuso, F., Alcaro, S. 1,5-Diphenylpenta-2,4-dien-1-ones as potent and selective monoamine oxidase-B inhibitors (2013) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 59, pp. 91-100., DOI: 10.1016/j.ejmech.2012.11.006
  129. Chimenti, P., Petzer, A., Carradori, S., D'Ascenzio, M., Silvestri, R., Alcaro, S., Ortuso, F., Petzer, J.P., Secci, D. Exploring 4-substituted-2-thiazolylhydrazones from 2-, 3-, and 4-acetylpyridine as selective and reversible hMAO-B inhibitors (2013) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 66, pp. 221-227., DOI: 10.1016/j.ejmech.2013.05.032
  130. Milelli, A., Tumiatti, V., Micco, M., Rosini, M., Zuccari, G., Raffaghello, L., Bianchi, G., Pistoia, V., Fernando Díaz, J., Pera, B., Trigili, C., Barasoain, I., Musetti, C., Toniolo, M., Sissi, C., Alcaro, S., Moraca, F., Zini, M., Stefanelli, C., Minarini, A. Structure-activity relationships of novel substituted naphthalene diimides as anticancer agents (2012) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 57, pp. 417-428., DOI: 10.1016/j.ejmech.2012.06.045
  131. Cross, S., Ortuso, F., Baroni, M., Costa, G., Distinto, S., Moraca, F., Alcaro, S., Cruciani, G. GRID-based three-dimensional pharmacophores II: Pharmbench, a benchmark data set for evaluating pharmacophore elucidation methods (2012) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 52 (10), pp. 2599-2608., DOI: 10.1021/ci300154n
  132. Paduano, F., Ortuso, F., Campiglia, P., Raso, C., Iaccino, E., Gaspari, M., Gaudio, E., Mangone, G., Carotenuto, A., Bilotta, A., Narciso, D., Palmieri, C., Agosti, V., Artese, A., Gomez-Monterrey, I., Sala, M., Cuda, G., Iuliano, R., Perrotti, N., Scala, G., Viglietto, G., Alcaro, S., Croce, C.M., Novellino, E., Fusco, A., Trapasso, F. Isolation and functional characterization of peptide agonists of PTPRJ, a tyrosine phosphatase receptor endowed with tumor suppressor activity (2012) *ACS Chemical Biology*, 7 (10), pp. 1666-1676., DOI: 10.1021/cb300281t
  133. Michelini, M.D.C., Russo, N., Alcaro, S., Wozniak, L.A. Theoretical and structural studies on mechanism of the Stec reaction (2012) *Tetrahedron*, 68 (27-28), pp. 5554-5563., DOI: 10.1016/j.tet.2012.04.081
  134. Cento, V., Mirabelli, C., Salpini, R., Dimonte, S., Artese, A., Costa, G., Mercurio, F., Svicher, V., Parrotta, L., Bertoli, A.,

- Ciotti, M., Di Paolo, D., Sarrecchia, C., Andreoni, M., Alcaro, S., Angelico, M., Perno, C.F., Ceccherini-Silberstein, F. HCV genotypes are differently prone to the development of resistance to linear and macrocyclic protease inhibitors (2012) *PLoS ONE*, 7 (7), art. no. e39652, DOI: 10.1371/journal.pone.0039652
135. Alcaro, S. Editorial: The impact of the G-quadruplex conformation in the development of novel therapeutic and diagnostic agents (2012) *Current Pharmaceutical Design*, 18 (14), pp. 1865-1866., DOI: 10.2174/138161212799958413
136. Alcaro, S., Costa, G., Distinto, S., Moraca, F., Ortuso, F., Parrotta, L., Artese, A. The polymorphisms of DNA G-quadruplex investigated by docking experiments with telomestatin enantiomers (2012) *Current Pharmaceutical Design*, 18 (14), pp. 1873-1879., DOI: 10.2174/138161212799958495
137. Varela, C., Tavares Da Silva, E.J., Amaral, C., Correia Da Silva, G., Baptista, T., Alcaro, S., Costa, G., Carvalho, R.A., Teixeira, N.A.A., Roleira, F.M.F. New structure-activity relationships of A- and D-ring modified steroidal aromatase inhibitors: Design, synthesis, and biochemical evaluation (2012) *Journal of Medicinal Chemistry*, 55 (8), pp. 3992-4002., DOI: 10.1021/jm300262w
138. Doria, F., Nadai, M., Folini, M., Di Antonio, M., Germani, L., Percivalle, C., Sissi, C., Zaffaroni, N., Alcaro, S., Artese, A., Richter, S.N., Freccero, M. Hybrid ligand-alkylating agents targeting telomeric G-quadruplex structures (2012) *Organic and Biomolecular Chemistry*, 10 (14), pp. 2798-2806., DOI: 10.1039/c2ob06816h
139. Distinto, S., Esposito, F., Kirchmair, J., Cardia, M.C., Gaspari, M., MacCioni, E., Alcaro, S., Markt, P., Wolber, G., Zinzula, L., Tramontano, E. Identification of HIV-1 reverse transcriptase dual inhibitors by a combined shape-, 2D-fingerprint- and pharmacophore-based virtual screening approach (2012) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 50, pp. 216-229., DOI: 10.1016/j.ejmech.2012.01.056
140. Alcaro, S., Bolasco, A., Cirilli, R., Ferretti, R., Fioravanti, R., Ortuso, F. Computer-aided molecular design of asymmetric pyrazole derivatives with exceptional enantioselective recognition toward the Chiralcel OJ-H stationary phase (2012) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 52 (3), pp. 649-654., DOI: 10.1021/ci200592h
141. Distinto, S., Yáñez, M., Alcaro, S., Cardia, M.C., Gaspari, M., Sanna, M.L., Meleddu, R., Ortuso, F., Kirchmair, J., Markt, P., Bolasco, A., Wolber, G., Secci, D., MacCioni, E. Synthesis and biological assessment of novel 2-thiazolyhydrazones and computational analysis of their recognition by monoamine oxidase B (2012) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 48, pp. 284-295., DOI: 10.1016/j.ejmech.2011.12.027
142. Alcaro, S., Alteri, C., Artese, A., Ceccherini-Silberstein, F., Costa, G., Ortuso, F., Bertoli, A., Forbici, F., Santoro, M.M., Parrotta, L., Flandre, P., Masquelier, B., Descamps, D., Calvez, V., Marcelin, A.-G., Perno, C.F., Sing, T., Svicher, V. Docking Analysis and Resistance Evaluation of Clinically Relevant Mutations Associated with the HIV-1 Non-nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors Nevirapine, Efavirenz and Etravirine (2011) *ChemMedChem*, 6 (12), pp. 2203-2213., DOI: 10.1002/cmdc.201100362
143. Svicher, V., Alteri, C., Artese, A., Zhang, J.M., Costa, G., Mercurio, F., D'Arrigo, R., Alcaro, S., Palù, G., Clementi, M., Zazzi, M., Andreoni, M., Antinori, A., Lazzarin, A., Ceccherini-Silberstein, F., Perno, C.F. Identification and

- structural characterization of novel genetic elements in the HIV-1 V3 loop regulating coreceptor usage (2011) *Antiviral Therapy*, 16 (7), pp. 1035-1045., DOI: 10.3851/IMP1862
144. Secci, D., Carradori, S., Bolasco, A., Chimenti, P., Yáñez, M., Ortuso, F., Alcaro, S. Synthesis and selective human monoamine oxidase inhibition of 3-carbonyl, 3-acyl, and 3-carboxyhydrazido coumarin derivatives (2011) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 46 (10), pp. 4846-4852., DOI: 10.1016/j.ejmech.2011.07.017
  145. MacCioni, E., Alcaro, S., Cirilli, R., Vigo, S., Cardia, M.C., Sanna, M.L., Meleddu, R., Yanez, M., Costa, G., Casu, L., Matyus, P., Distinto, S. 3-Acetyl-2,5-diaryl-2,3-dihydro-1,3,4-oxadiazoles: A new scaffold for the selective inhibition of monoamine oxidase B (2011) *Journal of Medicinal Chemistry*, 54 (18), pp. 6394-6398., DOI: 10.1021/jm2002876
  146. Anzini, M., Valenti, S., Braile, C., Cappelli, A., Vomero, S., Alcaro, S., Ortuso, F., Marinelli, L., Limongelli, V., Novellino, E., Betti, L., Giannaccini, G., Lucacchini, A., Daniele, S., Martini, C., Ghelardini, C., Di Cesare Mannelli, L., Giorgi, G., Mascia, M.P., Biggio, G. New insight into the central benzodiazepine receptor-ligand interactions: Design, synthesis, biological evaluation, and molecular modeling of 3-substituted 6-phenyl-4 H -imidazo[1,5- a][1,4]benzodiazepines and related compounds (2011) *Journal of Medicinal Chemistry*, 54 (16), pp. 5694-5711., DOI: 10.1021/jm2001597
  147. Cirilli, R., Alcaro, S., Fioravanti, R., Ferretti, R., Bolasco, A., Gallinella, B., Faggi, C. A chromatographic study on the exceptional enantioselectivity of cellulose tris(4-methylbenzoate) towards C5-chiral 4,5-dihydro-(1H)-pyrazole derivatives (2011) *Journal of Chromatography A*, 1218 (33), pp. 5653-5657., DOI: 10.1016/j.chroma.2011.06.081
  148. Alcaro, S., Artese, A., Costa, G., Distinto, S., Ortuso, F., Parrotta, L. Conformational studies and solvent-accessible surface area analysis of known selective DNA G-Quadruplex binders (2011) *Biochimie*, 93 (8), pp. 1267-1274., DOI: 10.1016/j.biochi.2011.06.014
  149. Gaspar, A., Silva, T., Yáñez, M., Vina, D., Orallo, F., Ortuso, F., Uriarte, E., Alcaro, S., Borges, F. Chromone, a privileged scaffold for the development of monoamine oxidase inhibitors (2011) *Journal of Medicinal Chemistry*, 54 (14), pp. 5165-5173., DOI: 10.1021/jm2004267
  150. Alcaro, S., Alteri, C., Artese, A., Ceccherini-Silberstein, F., Costa, G., Ortuso, F., Parrotta, L., Perno, C.F., Svicher, V. Molecular and structural aspects of clinically relevant mutations related to the approved non-nucleoside inhibitors of HIV-1 reverse transcriptase (2011) *Drug Resistance Updates*, 14 (3), pp. 141-149., DOI: 10.1016/j.drug.2011.01.002
  151. Desideri, N., Bolasco, A., Fioravanti, R., Proietti Monaco, L., Orallo, F., Yáñez, M., Ortuso, F., Alcaro, S. Homoisoflavonoids: Natural scaffolds with potent and selective monoamine oxidase-B inhibition properties (2011) *Journal of Medicinal Chemistry*, 54 (7), pp. 2155-2164., DOI: 10.1021/jm1013709
  152. Gaspar, A., Teixeira, F., Uriarte, E., Milhazes, N., Melo, A., Cordeiro, M.N.D.S., Ortuso, F., Alcaro, S., Borges, F. Towards the Discovery of a Novel Class of Monoamine Oxidase Inhibitors: Structure-Property-Activity and Docking Studies on Chromone Amides (2011) *ChemMedChem*, 6 (4), pp. 628-632., DOI: 10.1002/cmdc.201000452
  153. Fioravanti, R., Bolasco, A., Manna, F., Rossi, F., Orallo, F., Ortuso, F., Alcaro, S., Cirilli, R. Synthesis and biological evaluation of N-substituted-3,5-diphenyl-2- pyrazoline

- derivatives as cyclooxygenase (COX-2) inhibitors (2010) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 45 (12), pp. 6135-6138., DOI: 10.1016/j.ejmech.2010.10.005
154. Fioravanti, R., Bolasco, A., Manna, F., Rossi, F., Orallo, F., Yáñez, M., Vitali, A., Ortuso, F., Alcaro, S. Synthesis and molecular modelling studies of prenylated pyrazolines as MAO-B inhibitors (2010) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 20 (22), pp. 6479-6482., DOI: 10.1016/j.bmcl.2010.09.061
155. Svicher, V., Alteri, C., Artese, A., Forbici, F., Santoro, M.M., Schols, D., Van Laethem, K., Alcaro, S., Costa, G., Tommasi, C., Zaccarelli, M., Narciso, P., Antinori, A., Ceccherini-Silberstein, F., Balzarini, J., Perno, C.F. Different evolution of genotypic resistance profiles to emtricitabine versus lamivudine in tenofovir-containing regimens (2010) *Journal of Acquired Immune Deficiency Syndromes*, 55 (3), pp. 336-344., DOI: 10.1097/QAI.0b013e3181e6763f
156. MacCioni, E., Alcaro, S., Orallo, F., Cardia, M.C., Distinto, S., Costa, G., Yanez, M., Sanna, M.L., Vigo, S., Meleddu, R., Secci, D. Synthesis of new 3-aryl-4,5-dihydropyrazole-1-carbothioamide derivatives. An investigation on their ability to inhibit monoamine oxidase (2010) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 45 (10), pp. 4490-4498., DOI: 10.1016/j.ejmech.2010.07.009
157. Ceccherini-Silberstein, F., Malet, I., Fabeni, L., Dimonte, S., Svicher, V., D'Arrigo, R., Artese, A., Costa, G., Bono, S., Alcaro, S., d'Arminio Monforte, A., Katlama, C., Calvez, V., Antinori, A., Marcelin, A.-G., Perno, C.-F. Specific HIV-1 integrase polymorphisms change their prevalence in untreated versus antiretroviral-treated HIV-1-infected patients, all naive to integrase inhibitors (2010) *Journal of Antimicrobial Chemotherapy*, 65 (11), art. no. dkq326, pp. 2305-2318., DOI: 10.1093/jac/dkq326
158. Alcaro, S., Artese, A., Botta, M., Zizzari, A.T., Orallo, F., Ortuso, F., Schenone, S., Brullo, C., Yáñez, M. Hit identification and biological evaluation of anticancer pyrazolopyrimidines endowed with anti-inflammatory activity (2010) *ChemMedChem*, 5 (8), pp. 1242-1246., DOI: 10.1002/cmdc.201000165
159. Chimenti, F., Bolasco, A., Secci, D., Chimenti, P., Granese, A., Carradori, S., Yáñez, M., Orallo, F., Ortuso, F., Alcaro, S. Investigations on the 2-thiazolylhydrazine scaffold: Synthesis and molecular modeling of selective human monoamine oxidase inhibitors (2010) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 18 (15), pp. 5715-5723., DOI: 10.1016/j.bmc.2010.06.007
160. Chimenti, F., Secci, D., Bolasco, A., Chimenti, P., Granese, A., Carradori, S., MacCioni, E., Cardia, M.C., Yáñez, M., Orallo, F., Alcaro, S., Ortuso, F., Cirilli, R., Ferretti, R., Distinto, S., Kirchmair, J., Langer, T. Synthesis, semipreparative HPLC separation, biological evaluation, and 3D-QSAR of hydrazothiazole derivatives as human monoamine oxidase B inhibitors (2010) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 18 (14), pp. 5063-5070., DOI: 10.1016/j.bmc.2010.05.070
161. Alcaro, S., Gaspar, A., Ortuso, F., Milhazes, N., Orallo, F., Uriarte, E., Yáñez, M., Borges, F. Chromone-2- and -3-carboxylic acids inhibit differently monoamine oxidases A and B (2010) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 20 (9), pp. 2709-2712., DOI: 10.1016/j.bmcl.2010.03.081
162. Alcaro, S., Artese, A., Iley, J.N., Missailidis, S., Ortuso, F., Parrotta, L., Pasceri, R., Paduano, F., Sissi, C., Trapasso, R.,

- Vigorita, M.G. Rational design, synthesis, biophysical and antiproliferative evaluation of fluorenone derivatives with DNA G-quadruplex binding properties (2010) *ChemMedChem*, 5 (4), pp. 575-583., DOI: 10.1002/cmdc.200900541
163. Alcaro, S., Artese, A., Ceccherini-Silberstein, F., Chiarella, V., Dimonte, S., Ortuso, F., Perno, C.F. Computational analysis of human immunodeficiency virus (HIV) type-1 reverse transcriptase crystallographic models based on significant conserved residues found in highly active antiretroviral therapy (HAART)-treated patients (2010) *Current Medicinal Chemistry*, 17 (4), pp. 290-308., DOI: 10.2174/092986710790192695
164. Chimenti, F., Fioravanti, R., Bolasco, A., Chimenti, P., Secci, D., Rossi, F., Yáñez, M., Orallo, F., Ortuso, F., Alcaro, S., Cirilli, R., Ferretti, R., Sanna, M.L. A new series of flavones, thioflavones, and flavanones as selective monoamine oxidase-B inhibitors (2010) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 18 (3), pp. 1273-1279., DOI: 10.1016/j.bmc.2009.12.029
165. Alcaro, S., Arcone, R., Costa, G., De Vita, D., Iannone, M., Ortuso, F., Procopio, A., Pasceri, R., Rotiroti, D., Scipione, L. Simple choline esters as potential anti-Alzheimer agents (2010) *Current Pharmaceutical Design*, 16 (6), pp. 692-697., DOI: 10.2174/138161210790883796
166. Procopio, A., Alcaro, S., Nardi, M., Oliverio, M., Ortuso, F., Sacchetta, P., Pieragostino, D., Sindona, G. Synthesis, biological evaluation, and molecular modeling of oleuropein and its semisynthetic derivatives as cyclooxygenase inhibitors (2009) *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 57 (23), pp. 11161-11167., DOI: 10.1021/jf9033305
167. Puertas, M.C., Buzón, M.J., Artese, A., Alcaro, S., Menendez-Arias, L., Perno, C.F., Clotet, B., Ceccherini-Silberstein, F., Martínez-Picado, J. Effect of the human immunodeficiency virus type 1 reverse transcriptase polymorphism Leu-214 on replication capacity and drug susceptibility (2009) *Journal of Virology*, 83 (15), pp. 7434-7439., DOI: 10.1128/JVI.00487-09
168. Alcaro, S., Artese, A., Ceccherini-Silberstein, F., Ortuso, F., Perno, C.F., Sing, T., Svicher, V. Molecular dynamics and free energy studies on the wild-type and mutated hiv-1 protease complexed with four approved drugs: Mechanism of binding and drug resistance (2009) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 49 (7), pp. 1751-1761., DOI: 10.1021/ci900012k
169. Cirilli, R., Alcaro, S., Fioravanti, R., Secci, D., Fiore, S., La Torre, F., Ortuso, F. Unusually high enantioselectivity in high-performance liquid chromatography using cellulose tris(4-methylbenzoate) as a chiral stationary phase (2009) *Journal of Chromatography A*, 1216 (22), pp. 4673-4678., DOI: 10.1016/j.chroma.2009.04.013
170. Caruso, A., Garofalo, A., Grande, F., Aiello, F., Anzini, M., Ortuso, F., Alcaro, S., Panno, A., Saturnino, C., Sinicropi, M.S. Synthesis and biological evaluation of 1,3-indandione derivatives as acetylcholinesterase inhibitors (2009) *Pharmacologyonline*, 1, pp. 264-277.
171. Chimenti, F., Fioravanti, R., Bolasco, A., Chimenti, P., Secci, D., Rossi, F., Yáñez, M., Orallo, F., Ortuso, F., Alcaro, S. Chalcones: A valid scaffold for monoamine oxidases inhibitors (2009) *Journal of Medicinal Chemistry*, 52 (9), pp. 2818-2824., DOI: 10.1021/jm801590u
172. Chimenti, F., Secci, D., Bolasco, A., Chimenti, P., Bizzarri, B., Granese, A., Carradori, S., Yáñez, M., Orallo, F., Ortuso, F.,

- Alcaro, S. Synthesis, molecular modeling, and selective inhibitory activity against human monoamine oxidases of 3-carboxamido-7-substituted coumarins (2009) *Journal of Medicinal Chemistry*, 52 (7), pp. 1935-1942., DOI: 10.1021/jm801496u
173. Alcaro, S., Artese, A., Ortuso, F. Rational Approaches to Anticancer Drug Design/in silico Drug Development (2008) *Anticancer Therapeutics*, pp. 29-46., DOI: 10.1002/9780470697047.ch3
174. Chimenti, F., Fioravanti, R., Bolasco, A., Manna, F., Chimenti, P., Secci, D., Rossi, F., Turini, P., Ortuso, F., Alcaro, S., Cardia, M.C. Synthesis, molecular modeling studies and selective inhibitory activity against MAO of N1-propanoyl-3,5-diphenyl-4,5-dihydro-(1H)-pyrazole derivatives (2008) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 43 (10), pp. 2262-2267., DOI: 10.1016/j.ejmech.2007.12.026
175. Chimenti, F., Maccioni, E., Secci, D., Bolasco, A., Chimenti, P., Granese, A., Carradori, S., Alcaro, S., Ortuso, F., Yáñez, M., Orallo, F., Cirilli, R., Ferretti, R., La Torre, F. Synthesis, stereochemical identification, and selective inhibitory activity against human monoamine oxidase-B of 2-methylcyclohexylidene-(4-arylthiazol-2-yl)hydrazones (2008) *Journal of Medicinal Chemistry*, 51 (16), pp. 4874-4880., DOI: 10.1021/jm800132g
176. Alcaro, S., Gontrani, L., Incani, O., Ortuso, F. Computational methods applied to the discovery of stem cell factor ligands (2008) *Theoretical Chemistry Accounts*, 120 (4-6), pp. 523-531., DOI: 10.1007/s00214-008-0431-x
177. Celano, M., Schenone, S., Cosco, D., Navarra, M., Puxeddu, E., Racanicchi, L., Brullo, C., Varano, E., Alcaro, S., Ferretti, E., Botta, G., Filetti, S., Fresta, M., Botta, M., Russo, D. Cytotoxic effects of a novel pyrazolopyrimidine derivative entrapped in liposomes in anaplastic thyroid cancer cells in vitro and in xenograft tumors in vivo (2008) *Endocrine-Related Cancer*, 15 (2), pp. 499-510., DOI: 10.1677/ERC-07-0243
178. Svicher, V., Aquaro, S., D'Arrigo, R., Artese, A., Dimonte, S., Alcaro, S., Santoro, M.M., Di Perri, G., Lo Caputo, S., Bellagamba, R., Zaccarelli, M., Visco-Comandini, U., Antinori, A., Narciso, P., Ceccherini-Silberstein, F., Perno, C.-F. Specific enfuvirtide-associated mutational pathways in HIV-1 Gp41 are significantly correlated with an increase in CD4 + cell count, despite virological failure (2008) *Journal of Infectious Diseases*, 197 (10), pp. 1408-1418., DOI: 10.1086/587693
179. Cairo, P., Ortuso, F., Alcaro, S., Fontananova, E., Tocci, E., Drioli, E.  $\beta$ -Cyclodextrin interactions with three drugs used in inflammatory pathologies: An experimental and theoretical study (2008) *Chemical Physics Letters*, 454 (4-6), pp. 374-381., DOI: 10.1016/j.cplett.2008.02.050
180. Urbano, M., Collina, S., Rossi, D., Carnevale Baraglia, A., Alcaro, S., Artese, A., Azzolina, O. Design and synthesis of a (N-alkylaminoalkyl-substituted)arylalkenylamide drug discovery library (2007) *Letters in Drug Design and Discovery*, 4 (8), pp. 605-610., DOI: 10.2174/157018007782794581
181. Barreca, M.L., Ortuso, F., Iraci, N., De Luca, L., Alcaro, S., Chimirri, A. Tn5 transposase as a useful platform to simulate HIV-1 integrase inhibitor binding mode (2007) *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 363 (3), pp. 554-560., DOI: 10.1016/j.bbrc.2007.08.199
182. Ceccherini-Silberstein, F., Svicher, V., Sing, T., Artese, A.,



- Santoro, M.M., Forbici, F., Bertoli, A., Alcaro, S., Palamara, G., Monforte, A.D'A., Balzarini, J., Antinori, A., Lengauer, T., Perno, C.F. Characterization and structural analysis of novel mutations in human immunodeficiency virus type 1 reverse transcriptase involved in the regulation of resistance to nonnucleoside inhibitors (2007) *Journal of Virology*, 81 (20), pp. 11507-11519., DOI: 10.1128/JVI.00303-07
183. Alcaro, S., Arcone, R., Vecchio, I., Ortuso, F., Gallelli, A., Pasceri, R., Procopio, A., Iannone, M. Molecular modelling and enzymatic studies of acetylcholinesterase and butyrylcholinesterase recognition with paraquat and related compounds (2007) *SAR and QSAR in Environmental Research*, 18 (5-6), pp. 595-602., DOI: 10.1080/10629360701428433
184. Coleman, R.S., Woodward, R.L., Hayes, A.M., Crane, E.A., Artese, A., Ortuso, F., Alcaro, S. Dependence of DNA sequence selectivity and cell cytotoxicity on azinomycin A and B epoxyamide stereochemistry (2007) *Organic Letters*, 9 (10), pp. 1891-1894., DOI: 10.1021/ol070395s
185. Alcaro, S., Artese, A., Iley, J.N., Maccari, R., Missailidis, S., Ortuso, F., Ottanà, R., Ragazzon, P., Vigorita, M.G. Tetraplex DNA specific ligands based on the fluorenone-carboxamide scaffold (2007) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 17 (9), pp. 2509-2514., DOI: 10.1016/j.bmcl.2007.02.022
186. Alcaro, S., Gasparrini, F., Incani, O., Caglioti, L., Pierini, M., Villani, C. "Quasi flexible" automatic docking processing for studying stereoselective recognition mechanisms, part 2: Prediction of  $\Delta\Delta G$  of complexation and <sup>1</sup>H-NMR NOE correlation (2007) *Journal of Computational Chemistry*, 28 (6), pp. 1119-1128., DOI: 10.1002/jcc.20655
187. Palocci, C., Falconi, M., Alcaro, S., Tafi, A., Puglisi, R., Ortuso, F., Botta, M., Alberghina, L., Cernia, E. An approach to address *Candida rugosa* lipase regioselectivity in the acylation reactions of trytilated glucosides (2007) *Journal of Biotechnology*, 128 (4), pp. 908-918., DOI: 10.1016/j.jbiotec.2006.08.019
188. Chimenti, F., Maccioni, E., Secci, D., Bolasco, A., Chimenti, P., Granese, A., Befani, O., Turini, P., Alcaro, S., Ortuso, F., Cardia, M.C., Distinto, S. Selective inhibitory activity against MAO and molecular modeling studies of 2-thiazolylhydrazone derivatives (2007) *Journal of Medicinal Chemistry*, 50 (4), pp. 707-712., DOI: 10.1021/jm060869d
189. Chimenti, F., Fioravanti, R., Bolasco, A., Manna, F., Chimenti, P., Secci, D., Befani, O., Turini, P., Ortuso, F., Alcaro, S. Monoamine oxidase isoform-dependent tautomeric influence in the recognition of 3,5-diaryl pyrazole inhibitors (2007) *Journal of Medicinal Chemistry*, 50 (3), pp. 425-428., DOI: 10.1021/jm060868l
190. Collina, S., Loddo, G., Urbano, M., Linati, L., Callegari, A., Ortuso, F., Alcaro, S., Laggner, C., Langer, T., Prezzavento, O., Ronsisvalle, G., Azzolina, O. Design, synthesis, and SAR analysis of novel selective  $\sigma_1$  ligands (2007) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 15 (2), pp. 771-783., DOI: 10.1016/j.bmc.2006.10.048
191. Ortuso, F., Alcaro, S., Langer, T. GRID-Based Pharmacophore Models: Concept and Application Examples (2006) *Pharmacophores and Pharmacophore Searches*, pp. 151-170., DOI: 10.1002/3527609164.ch7
192. Azzolina, O., Collina, S., Rossi, D., Carnevale Baraglia, A., Alcaro, S., Artese, A. High-throughput lipophilicity screening of opioid-like analgesics: Validation of computational methods by means of RP-HPLC analysis (2006) *Letters in Drug Design*

- and Discovery, 3 (6), pp. 413-418., DOI: 10.2174/157018006777805530
193. Chimenti, F., Secci, D., Bolasco, A., Chimenti, P., Granese, A., Carradori, S., Befani, O., Turini, P., Alcaro, S., Ortuso, F. Synthesis, molecular modeling studies, and selective inhibitory activity against monoamine oxidase of N,N'-bis[2-oxo-2H-benzopyran]-3-carboxamides (2006) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 16 (15), pp. 4135-4140., DOI: 10.1016/j.bmcl.2006.04.026
  194. Magnani, M., Ortuso, F., Soro, S., Alcaro, S., Tramontano, A., Botta, M. The  $\beta$ I/ $\beta$ III-tubulin isoforms and their complexes with antimetabolic agents: Docking and molecular dynamics studies (2006) *FEBS Journal*, 273 (14), pp. 3301-3310., DOI: 10.1111/j.1742-4658.2006.05340.x
  195. Calabrò, M.L., Raneri, D., Tommasini, S., Ficarra, R., Alcaro, S., Gallelli, A., Micale, N., Zappalà, M., Ficarra, P. Enantioselective recognition of 2,3-benzodiazepin-4-one derivatives with anticonvulsant activity on several polysaccharide chiral stationary phases (2006) *Journal of Chromatography B: Analytical Technologies in the Biomedical and Life Sciences*, 838 (1), pp. 56-62., DOI: 10.1016/j.jchromb.2006.04.029
  196. Ortuso, F., Langer, T., Alcaro, S. GBPM: GRID-based pharmacophore model: Concept and application studies to protein-protein recognition (2006) *Bioinformatics*, 22 (12), pp. 1449-1455., DOI: 10.1093/bioinformatics/btl115
  197. Chimenti, F., Cottiglia, F., Bonsignore, L., Casu, L., Casu, M., Floris, C., Secci, D., Bolasco, A., Chimenti, P., Granese, A., Befani, O., Turini, P., Alcaro, S., Ortuso, F., Trombetta, G., Loizzo, A., Guarino, I. Quercetin as the active principle of *Hypericum hircinum* exerts a selective inhibitory activity against MAO-A: Extraction, biological analysis, and computational study (2006) *Journal of Natural Products*, 69 (6), pp. 945-949., DOI: 10.1021/np060015w
  198. Collina, S., Loddo, G., Urbano, M., Rossi, D., Mamolo, M.G., Zampieri, D., Alcaro, S., Gallelli, A., Azzolina, O. Enantioselective chromatography and absolute configuration of N,N-dimethyl-3-(naphthalen-2-yl)-butan-1-amines: Potential Sigma1 ligands (2006) *Chirality*, 18 (4), pp. 245-253., DOI: 10.1002/chir.20227
  199. Chimenti, F., Bolasco, A., Manna, F., Secci, D., Chimenti, P., Granese, A., Befani, O., Turini, P., Cirilli, R., La Torre, F., Alcaro, S., Ortuso, F., Langer, T. Synthesis, biological evaluation and 3D-QSAR of 1,3,5-trisubstituted-4,5-dihydro-(1H)-pyrazole derivatives as potent and highly selective monoamine oxidase A inhibitors (2006) *Current Medicinal Chemistry*, 13 (12), pp. 1411-1428., DOI: 10.2174/092986706776872907
  200. Chimenti, F., Bolasco, A., Manna, F., Secci, D., Chimenti, P., Granese, A., Befani, O., Turini, P., Alcaro, S., Ortuso, F. Synthesis and molecular modelling of novel substituted-4,5-dihydro-(1H)- pyrazole derivatives as potent and highly selective monoamine oxidase-A inhibitors (2006) *Chemical Biology and Drug Design*, 67 (3), pp. 206-214., DOI: 10.1111/j.1747-0285.2006.00367.x
  201. Chimenti, F., Maccioni, E., Secci, D., Bolasco, A., Chimenti, P., Granese, A., Befani, O., Turini, P., Alcaro, S., Ortuso, F., Cirilli, R., La Torre, F., Cardia, M.C., Distinto, S. Synthesis, molecular modeling studies, and selective inhibitory activity against monoamine oxidase of 1-thiocarbamoyl-3,5-diaryl-4,5-dihydro-(1H)- pyrazole derivatives (2005) *Journal of Medicinal Chemistry*, 48 (23), pp. 7113-7122., DOI:

- 10.1021/jm040903t
202. Tafi, A., Agamennone, M., Tortorella, P., Alcaro, S., Gallina, C., Botta, M. AMBER force field implementation of the boronate function to simulate the inhibition of  $\beta$ -lactamases by alkyl and aryl boronic acids (2005) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 40 (11), pp. 1134-1142., DOI: 10.1016/j.ejmech.2005.06.011
  203. Procopio, A., Alcaro, S., Cundari, S., De Nino, A., Ortuso, F., Sacchetta, P., Pennelli, A., Sindona, G. Molecular modeling, synthesis, and preliminary biological evaluation of glutathione-S-transferase inhibitors as potential therapeutic agents (2005) *Journal of Medicinal Chemistry*, 48 (19), pp. 6084-6089., DOI: 10.1021/jm0504609
  204. Cappelli, A., Gallelli, A., Manini, M., Anzini, M., Mennuni, L., Makovec, F., Menziani, M.C., Alcaro, S., Ortuso, F., Vomero, S. Further studies on the interaction of the 5-hydroxytryptamine<sub>3</sub> (5-HT<sub>3</sub>) receptor with arylpiperazine ligands. Development of a new 5-HT<sub>3</sub> receptor ligand showing potent acetylcholinesterase inhibitory properties (2005) *Journal of Medicinal Chemistry*, 48 (10), pp. 3564-3575., DOI: 10.1021/jm0493461
  205. Alcaro, S., Arena, A., Di Bella, R., Neri, S., Ottanà, R., Ortuso, F., Pavone, B., Trincone, A., Vigorita, M.G. Biocatalysed synthesis of  $\beta$ -O-glucosides from 9-fluorenon-2-carbohydroxyesters. Part 3: IFN-inducing and anti-HSV-2 properties (2005) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 13 (10), pp. 3371-3378., DOI: 10.1016/j.bmc.2005.03.016
  206. Alcaro, S., Ortuso, F., Coleman, R.S. Molecular modeling of DNA cross-linking analogues based on the azinomycin scaffold (2005) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 45 (3), pp. 602-609., DOI: 10.1021/ci0496595
  207. Collina, S., Rossi, D., Loddo, G., Barbieri, A., Lanza, E., Linati, L., Alcaro, S., Gallelli, A., Azzolina, O. Chiral arylpyrrolidinols: Preparation and biological profile (2005) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 13 (9), pp. 3117-3126., DOI: 10.1016/j.bmc.2005.02.054
  208. Colombo, S., Longhi, R., Alcaro, S., Ortuso, F., Sprocati, T., Flora, A., Borgese, N. N-myristoylation determines dual targeting of mammalian NADH-cytochrome b(5) reductase to ER and mitochondrial outer membranes by a mechanism of kinetic partitioning (2005) *Journal of Cell Biology*, 168 (5), pp. 735-745., DOI: 10.1083/jcb.200407082
  209. Procopio, A., Alcaro, S., De Nino, A., Maiuolo, L., Ortuso, F., Sindona, G. New conformationally locked bicyclic N,O-nucleoside analogues of antiviral drugs (2005) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 15 (3), pp. 545-550., DOI: 10.1016/j.bmcl.2004.11.048
  210. Collina, S., Loddo, G., Barbieri, A., Linati, L., Alcaro, S., Chimenti, P., Azzolina, O. Microwave assisted synthesis of chiral pyrrolines with biological activity (2004) *Tetrahedron Asymmetry*, 15 (22), pp. 3601-3608., DOI: 10.1016/j.tetasy.2004.10.001
  211. Chimenti, F., Secci, D., Bolasco, A., Chimenti, P., Granese, A., Befani, O., Turini, P., Alcaro, S., Ortuso, F. Inhibition of monoamine oxidases by coumarin-3-acyl derivatives: Biological activity and computational study (2004) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 14 (14), pp. 3697-3703., DOI: 10.1016/j.bmcl.2004.05.010
  212. Alcaro, S., Arena, A., Neri, S., Ottanà, R., Ortuso, F., Pavone, B., Vigorita, M.G. Design and synthesis of DNA-intercalating 9-fluorenyl- $\beta$ -O-glycosides as potential IFN-inducers, and antiviral and cytostatic agents (2004) *Bioorganic and*

- Medicinal Chemistry, 12 (7), pp. 1781-1791., DOI: 10.1016/j.bmc.2003.12.034
213. Alcaro, S., Battaglia, D., Ortuso, F. Molecular modeling of  $\beta$ -cyclodextrin inclusion complexes with pharmaceutical compounds (2004) *Arkivoc*, 2004 (5), pp. 107-117.
  214. Alcaro, S., Ortuso, F., Gallelli, A., Battaglia, D., Tafi, A., Botta, M. Conformational search of antisense nucleotides. Part 2 (2004) *Farmaco*, 59 (3), pp. 169-173., DOI: 10.1016/j.farmac.2003.12.003
  215. Alcaro, S., Arena, A., Di Bella, R., Neri, S., Ottanà, R., Ortuso, F., Pavone, B., Vigorita, M.G. 9-Fluorenon-4-carboxamides: Synthesis, conformational analysis, anti-HSV-2, and immunomodulatory evaluation. Note II (2004) *Arkivoc*, 2004 (5), pp. 334-348.
  216. Stasi, L.P., Mugnaini, C., Alcaro, S., Corelli, F., Botta, M. Synthesis and conformational studies of 3'-(2'-aminoborane-2'-deoxyuridyl)-5'-thymidyl hydrogen phosphate to be used in the construction of oligonucleotide sequences (2003) *Heterocycles*, 61, pp. 403-416.
  217. Alcaro, S., Ortuso, F., Battaglia, D., Anzini, M., Cappelli, A., Gallelli, A., Mohr, G.P., Vomero, S., Galli, A., Costagli, C., Makovec, F. Enzymatic and molecular modeling studies of 5-HT<sub>3</sub> receptor ligands based on pyrroloquinoline structure and provided with acetylcholinesterase inhibitory activity (2003) *Medicinal Chemistry Research*, 12 (3), pp. 147-160.
  218. Alcaro, S., Battaglia, D., Ortuso, F. Docking experiments showing similar recognition patterns of paclitaxel when interacting with different macromolecular targets (2003) *Farmaco*, 58 (9), pp. 691-698., DOI: 10.1016/S0014-827X(03)00108-3
  219. Collina, S., Azzolina, O., Vercesi, D., Brusotti, G., Rossi, D., Barbieri, A., Lanza, E., Mennuni, L., Alcaro, S., Battaglia, D., Linati, L., Ghislandi, V. Synthesis and pharmacological evaluation of new N-methyl-arylpyrrolidinols with analgesic activity (2003) *Farmaco*, 58 (9), pp. 939-946., DOI: 10.1016/S0014-827X(03)00152-6
  220. Vigorita, M.G., Ottanà, R., Monforte, F., Maccari, R., Monforte, M.T., Trovato, A., Taviano, M.F., Miceli, N., De Luca, G., Alcaro, S., Ortuso, F. Chiral 3,3'-(1,2-Ethanediy)-bis[2-(3,4-dimethoxyphenyl)-4-thiazolidinones] with anti-inflammatory activity. Part 11: Evaluation of COX-2 selectivity and modelling (2003) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 11 (6), pp. 999-1006., DOI: 10.1016/S0968-0896(02)00518-7
  221. Tafi, A., Manetti, F., Corelli, F., Botta, M., Alcaro, S. Structural flexibility of hyaluronan oligomers as probed by molecular modelling (2003) *Pure and Applied Chemistry*, 75 (2-3), pp. 359-366., DOI: 10.1351/pac200375020359
  222. Manna, F., Chimenti, F., Bolasco, A., Secci, D., Bizzarri, B., Befani, O., Turini, P., Mondov, B., Alcaro, S., Tafi, A. Inhibition of amine oxidases activity by 1-acetyl-3,5-diphenyl-4,5-dihydro-(1H)-pyrazole derivatives (2002) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 12 (24), pp. 3629-3633., DOI: 10.1016/S0960-894X(02)00699-6
  223. Alcaro, S., Scipione, L., Ortuso, F., Posca, S., Rispoli, V., Rotiroti, D. Molecular modeling and enzymatic studies of the interaction of a choline analogue and acetylcholinesterase (2002) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 12 (20), pp. 2899-2905., DOI: 10.1016/S0960-894X(02)00554-1
  224. Ottanaá, R., Mazzon, E., Dugo, L., Monforte, F., Maccari, R., Sautebin, L., De Luca, G., Vigorita, M.G., Alcaro, S., Ortuso, F., Caputi, A.P., Cuzzocrea, S. Modeling and biological

	<p>evaluation of 3,3'-(1,2-ethanediy)bis[2-(4-methoxyphenyl)-thiazolidin-4-one], a new synthetic cyclooxygenase-2 inhibitor (2002) <i>European Journal of Pharmacology</i>, 448 (1), pp. 71-80., DOI: 10.1016/S0014-2999(02)01888-5</p> <p>225. Alcaro, S., Ventura, C.A., Paolino, D., Battaglia, D., Ortuso, F., Cattel, L., Puglisi, G., Fresta, M. Preparation, characterization, molecular modeling and in vitro activity of paclitaxel-cyclodextrin complexes (2002) <i>Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters</i>, 12 (12), pp. 1637-1641., DOI: 10.1016/S0960-894X(02)00217-2</p> <p>226. Alcaro, S., Ortuso, F., Coleman, R.S. DNA cross-linking by azinomycin B: Monte Carlo simulations in the evaluation of sequence selectivity (2002) <i>Journal of Medicinal Chemistry</i>, 45 (4), pp. 861-870., DOI: 10.1021/jm011040w</p> <p>227. Alcaro, S., D'Acquarica, I., Gasparrini, F., Misiti, D., Pierini, M., Villani, C. Enantioselective semi-preparative HPLC of two 2-arylpropionic acids on glycopeptides containing chiral stationary phases (2002) <i>Tetrahedron Asymmetry</i>, 13 (1), pp. 69-75., DOI: 10.1016/S0957-4166(02)00046-0</p> <p>228. Alcaro, S., Tafi, A., Ortuso, F., Woniak, L.A., Gács-Baitz, E., Botta, M. Conformational search of antisense nucleotides (2001) <i>Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters</i>, 11 (17), pp. 2273-2277., DOI: 10.1016/S0960-894X(01)00401-2</p> <p>229. Secci, D., Chimenti, F., Lavagna, S.M., Bonsignore, L., Manna, F., Alcaro, S., Bolasco, A. Synthesis of the 4-hydroxyimino-3-carboxamide-2-quinolone with a new heterocyclization mechanism of the reaction between carbon suboxide and 2-aminobenzamidoxime (2000) <i>Heterocycles</i>, 53 (12), pp. 2789-2793., DOI: 10.3987/COM-00-9032</p> <p>230. Alcaro, S., Coleman, R.S. A molecular model for DNA cross-linking by the antitumor agent azinomycin B (2000) <i>Journal of Medicinal Chemistry</i>, 43 (15), pp. 2783-2788., DOI: 10.1021/jm990362l</p> <p>231. Ficarra, R., Calabrò, M.L., Alcaro, S., Tommasini, S., Melardi, S., Ficarra, P. Diastereo-enantioseparation of novel <math>\gamma</math>-lactamic derivatives on cellulose chiral stationary phases (2000) <i>Chromatographia</i>, 51 (7-8), pp. 411-416., DOI: 10.1007/BF02490477</p> <p>232. Alcaro, S., Gasparrini, F., Incani, O., Mecucci, S., Misiti, D., Pierini, M., Villani, C. A "Quasi-Flexible" Automatic Docking Processing for Studying Stereoselective Recognition Mechanisms. Part I. Protocol Validation (2000) <i>Journal of Computational Chemistry</i>, 21 (7), pp. 515-530., DOI: 10.1002/(SICI)1096-987X(200005)21:7&lt;515::AID-JCC2&gt;3.0.CO;2-5</p> <p>233. Alcaro, S., Coleman, R.S. Molecular Modeling of the Antitumor Agents Azinomycins A and B: Force-Field Parametrization and DNA Cross-Linking-Based Filtering (1998) <i>Journal of Organic Chemistry</i>, 63 (14), pp. 4620-4625., DOI: 10.1021/jo972274j</p> <p>234. Casarini, D., Lunazzi, L., Alcaro, S., Gasparrini, F., Villani, C. Atropisomerism in Hindered Naphthyl Sulfones Investigated by Dynamic NMR and Dynamic HPLC Techniques (1995) <i>Journal of Organic Chemistry</i>, 60 (17), pp. 5515-5519., DOI: 10.1021/jo00122a034</p>
Congressi, Seminari e Workshops	Stefano Alcaro è coautore di numerose comunicazioni Convegni nazionali ed esteri in campo Chimico Farmaceutico, delle quali si omette la lista per brevità.
Relazioni su invito	O1. Alcaro S. : "Metodi computazionali nello studio di farmaci antitumorali." Workshop " Prospettive di collaborazione scientifica tra le Facoltà di Farmacia delle Università di Reggio

- Calabria e "La Sapienza" di Roma: Individuazione di nuovi temi di ricerca", Catanzaro, 10 giugno 1997.
- O2. Alcaro S. : "Modellistica molecolare nella progettazione di nuovi farmaci", seminario su invito del Dipartimento di Farmacologia, Chemioterapia e Tossicologia Medica dell'Università degli Studi di Milano, 13 novembre 1997.
- O3. Alcaro S. : "Modeling della farmacocinetica e della farmacodinamica di derivati lipofili della colina", Workshop "Prospettive di collaborazione scientifica tra le Facoltà di Farmacia delle Università di Catanzaro "Magna Græcia" e di Roma "La Sapienza": progetti di ricerca attivati.", Catanzaro, 25 giugno 1998.
- O4. Alcaro S., Coleman R. S.: "Studio modellistico molecolare sulle interazioni tra Azinomycine e DNA: parametrizzazione, ricerca ed analisi conformazionale", XX Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Rimini, 6 giugno 2000.
- O5. Alcaro S., Ortuso F., Coleman R. S. "Monte Carlo simulation of DNA - azinomycin B interaction: case study of CPU intensive calculations distributed on UNIX platforms." *5° Workshop sul Calcolo ad Alte Prestazioni in Italia* 2001, Milano, 17 ottobre 2001.
- O6. Alcaro S.; Ortuso F.; Coleman R. S. "Rational drug design of Azinomycin analogs" *23 rd IUPAC- International Symposium on the Chemistry of natural products* – Florence – Italy- 28 luglio-2 agosto 2002 – O38.
- O7. Alcaro S. "Development and applications of algorithms for molecular recognition" 1<sup>st</sup> Workshop on "The state-of-the-art of Computational Chemistry in the Universities of Calabria and Basilicata", Cosenza, 19 febbraio 2003.
- O8. Alcaro S., Ortuso F., Gallelli A, Battaglia D. "Medicinal Chemistry Application of new docking methodology for Molecular Recognition studies." *14<sup>th</sup> Camerino-Noordwijkerhout Symposium "Ongoing Progress in the Receptor Chemistry"*, Camerino, 7-11 settembre 2003.
- O9. Alcaro S., Ortuso F., Gallelli A, Battaglia D. "MOLEcular INteraction Evaluation: an original docking methodology applied to drug design." *7° Workshop sul Calcolo ad Alte Prestazioni in Italia*, Milano, 13 Novembre 2003.
- O10. Alcaro S., Ortuso F., Gallelli A, Battaglia D. "Development, Validation and Application of the "MOLINE" Docking Program for Drug Design and Molecular Recognition studies." *V Congresso Nazionale di Chimica Computazionale*, Siena, 18-19 dicembre 2003.
- O11. Alcaro S. "Computational Chemistry research at the Department of Pharmacobiological Sciences" *2<sup>nd</sup> Workshop on "The state-of-the-art of Computational Chemistry in the Universities of Calabria and Basilicata"*, Catanzaro, 5-6 febbraio 2004.
- O12. Alcaro S., Ortuso F., Gallelli A, Battaglia D. "MOLINE docking experiments of enzyme-ligand complexes." *X International Conference on Theoretical Aspect of Catalysis*, Tropea, 25 -29 giugno 2004.
- O13. Alcaro S., Ortuso F., Gallelli A, Artese A., Procopio A., Coleman R. S. "Progettazione razionale di agenti bisalchilanti del DNA analoghi delle azinomycine." *XVII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana*, Pisa, 10 settembre 2004.
- O14. Alcaro S. Modelli computazionali nello studio di fenomeni chimico-fisici in campo farmaceutico e biomedico. Seminario Mathesis, Catanzaro, 15 marzo 2005.
- O15. Alcaro S. "La Chimica Computazionale del Dipartimento di Scienze Farmacobiologiche Università degli Studi "Magna

- Græcia” di Catanzaro” *GSCCB: Seconda Riunione e Aggiornamento in Tema di Biologia Computazionale*, Vibo Valentia, 17-18 marzo 2005.
- O16. Alcaro S., Ortuso F., Artese A., Coleman R. S. “Computational approaches in the drug design of DNA cross-linking agents”, *5th European Workshop in Drug Design*, Siena, 29 maggio - 5 giugno 2005 Certosa di Pontignano (SI).
- O17. Alcaro S. “GRID Based Pharmacophore Model: un nuovo approccio computazionale per l'identificazione e la progettazione di nuovi farmaci”, Seminario su invito presso l'industria Farmaceutica Dompè, L'Aquila, 7 giugno 2005.
- O18. Alcaro S., Ortuso F., Artese A. “Docking e Virtual Screening su composti naturali: esempi su quercitina e cucurbitacina.” Convegno su “*Erbe mediche: dalla ricerca di base alle possibili applicazioni in terapia*”, Parghelia (VV), 8 luglio 2005.
- O19. Alcaro S., Ortuso F., Perricelli P., Chimenti F., Bolasco A., Secci D. “Studio computazionale su inibitori selettivi delle monoamminoossidasi.” *Convegno Congiunto delle Sezioni SCI Calabria e Sicilia*, Catania, 5-6 dicembre 2005.
- O20. Alcaro S. “Conformational search & docking experiments of biomolecular systems: theory and case studies”, Erasmus invited lectures 5-6 giugno 2006, University of Innsbruck (Austria).
- O21. Alcaro S. “Innovative Molecular Modeling Approaches in Medicinal Chemistry” invited lectures 2-3 settembre 2006, Open University, Milton Keynes (United Kingdom).
- O22. Secci D., Chimenti F., Bolasco A., Alcaro S. “Synthesis, molecular modeling studies and selective inhibitory activity against monoamine oxidases of 3,7-disubstituted coumarins”, *XXII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana*, (FAR-IL-14) Firenze, 10-15 settembre 2006.
- O23. Alcaro S. “Descrizione e applicazioni in chimica farmaceutica del programma di modellistica molecolare MOLINE”, *I° Meeting Nuove Prospettive in Chimica Farmaceutica*, Salerno, 22-23 febbraio 2007.
- O24. Alcaro S. “Rational Drug Design of G-Quadruplex Dna Specific Ligands”, *3th Symposium on Theoretical Biophysics (TheoBio-07)*, Cetraro, 16-20 Giugno 2007.
- O25. Alcaro S. “Sviluppo e applicazione di nuovi strumenti chimico-computazionali” seminario su invito presso l'Università di Cagliari, 4 settembre 2007.
- O26. Alcaro S. “Progettazione razionale di ligandi selettivi per DNA G-quadruplex”, *XVIII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana*, Chieti, 16-20 Settembre 2007.
- O27. Alcaro S. “Sviluppo e applicazioni chimico-farmaceutiche di una nuova tecnica di docking”, seminario su invito presso l'Università di Bari, 6 marzo 2008.
- O28. Alcaro, S.; Artese, A.; Costa, G.; Ortuso, F.; Parrotta L. “Computational study on DNA G-quadruplex binding compounds”, *XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana*, Sorrento, 5-10 luglio 2009 (FAR-OR-1)
- O29. Alcaro, S.; Artese, A.; Ortuso, F. “Studi computazionali su ligandi innovativi per le cicloossigenasi”, *Convegno Congiunto delle Sezioni Calabria e Sicilia 2009*, Catania, 1-2 Dicembre 2009
- O30. Alcaro, S. G-quadruplex: target innovativo nello sviluppo di agenti antitumorali, seminario su invito della Facoltà di Farmacia dell'Università di Messina, 11 marzo 2010
- O31. Alcaro, S.; Artese, A.; Costa, G.; Distinto, S.; Ortuso, F.; Parrotta L. “Rational drug design of DNA G-quadruplex

- binders using in silico approaches”, 1st International Conference Early Cancer Detection: Environment, Biomarkers and Mechanisms. 14-17 maggio 2010, Porto Rocha (CZ)
- O32. Alcaro S. “G-quadruplex DNA: a new target against cancer”, Erasmus invited lectures 2 settembre 2010, University of Coimbra (Portogallo).
- O33. Alcaro, S.; Artese, A.; Costa, G.; Distinto, S.; Ortuso, F.; Parrotta, L. “Molecular Recognition Of Dna G-Quadruplex Ligands By Different Docking Methods”, XX National Meeting on Medicinal Chemistry, Abano Terme (Padova), 12-16 Settembre 2010 (SC6).
- O34. Alcaro, S. “Simulazioni di docking e dinamica molecolare di processi enantioselettivi ad alta efficienza”, Convegno Congiunto SCI Sezioni Calabria e Sicilia Palermo 2-3 dicembre 2010
- O35. Alcaro, S. “The DNA G-quadruplex fold as an attractive targeting structure against cancer.” *8th European Workshop in Drug Design*, Siena, 22 – 28 maggio, 2011 Certosa di Pontignano (SI).
- O36. Alcaro, S.; Maccioni, E. “The G-quadruplex fold of nucleic acids: a challenging target in anti-cancer drug design” 2<sup>nd</sup> Iberic Meeting on Medicinal Chemistry, 13 giugno 2011, Porto (Pt)
- O37. Alcaro, S. “Targeting the G-quadruplexfold of Nucleic Acids by Different Computational Drug Design Approaches”, 23 giugno 2011, Consorzio Sardegna Ricerca, Pula (CA)
- O38. Alcaro, S. “Identificazione di agenti bioattivi attraverso lo screening virtuale di librerie di composti naturali”, Convegno SCI Congiunto delle Sezioni Calabria e Sicilia 2011 Messina SCI 1-2 dicembre 2011
- O39. Alcaro, S. “Molecular Modelling of DNA G-quadruplex complexes”, 1° Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale SCI, Pisa, 22-23 febbraio 2012.
- O40. Alcaro, S. “Hit identification of bioactive natural compounds by virtual screening.” IV EWDSy Fourth European Workshop in Drug Syntesis, Siena , 27– 31 maggio 2012
- O41. Alcaro, S. “Updates about targeting the G-quadruplex DNA as new therapeutic approach against cancer”, Freie Universitat, Berlin, 4 settembre 2012
- O42. Alcaro S. “G-quadruplex nucleic acid conformations: potentially selective targets against viral and cancer diseases”, Summer School on Innovative Approaches for Identification of Antiviral Agents, September 30th – October 4th 2012 Santa Margherita di Pula, Sardinia
- O43. Alcaro S. “Diffusion of computational tools for Drug Design purposes: results of a survey among Italian Academic and Industrial Institutions” 2nd CDDD meeting Genova, 4-6 febbraio 2013
- O44. Alcaro, S. “Targeting the G-quadruplex nucleic acids by means of small molecules” seminario su invito presso l’Università di Pavia, 14 febbraio 2013.
- O45. Alcaro, S. “A drug discovery process overview: diffusion of in silico methods in the scientific community and successful experiences” seminario su invito presso l’Università Tor Vergata di Roma, 3 maggio 2013.
- O46. Alcaro, S. “DNA in conformazione G-quadruplex: target emergente ed innovativo per lo sviluppo di agenti antineoplastici”, seminario su invito presso l’Università di Modena, 20 maggio 2013.
- O47. Alcaro, S. “The pre-organization concept as paradigm in the evaluation of bioactive compounds and in the rational drug design process” seminario su invito presso l’Università Tor



	<p>Vergata di Roma, 24 maggio 2013.</p> <p>O48. Alcaro S. "Nucleic acids in G-quadruplex conformations as innovative targets against cancer", relazione su invito della Società Chimica Spagnola, XVIIth National Meeting on "Advances in Drug Discovery: Successes, Trends and Future Challenges" Madrid, 2-4 Ottobre, 2013.</p> <p>O49. Alcaro S. "MuTaLig: a COST Action to speed up the drug discovery process by means of the multi-targeting paradigm" keynote invitation at XXIV NMMC &amp; 10th NPCF - September 11th-14th 2016, Perugia (Italy)</p> <p>O50. Alcaro S. "The challenge of Multi-Targeting Drug Design seen from a computational chemistry point of view" keynote invitation at 17° Hellenic Symposium on Medicinal Chemistry - June 1-4 2017, Salonicco (Grecia)</p>
<p><b>TRASFERIMENTO TECNOLOGICO</b></p>	<p>Stefano Alcaro è promotore e fondatore dello spinoff universitario Net4Science (<a href="http://www.net4science.com">www.net4science.com</a>). Net4Science si è costituito il 18 dicembre 2018 ed è inserito nella lista delle startup innovative presso la Camera di Commercio di Catanzaro.</p> <p>Nell'ambito delle attività di trasferimento tecnologico dello spinoff universitario il 24 gennaio 2020 è stato depositata la richiesta del seguente brevetto europeo:</p> <p>ALCARO Stefano, COSTA Giosuè, GAUDIO Eugenio, GUL Sheraz, LUPIA Antonio, ORTUSO Francesco, RAPPOSELLI Simona, ROCCA Roberta, SESTITO Simona, TRAPASSO Francesco "Multitarget small molecules with a 2-aminoquinazolin-4-one scaffold and their use in cancer" EP20153544, 2020.</p>