

PERSONAL INFORMATION

NOME E COGNOME

Rino Ragno

DATA DI NASCITA

7 giugno 1965

LUOGO DI NASCITA


Roma

CITTADINANZA

Italiana

SESSO

Machile

 Via Francesco Torraca, 5 00125 Rome +39 06 52 57 006 e-mail: spider.rino@gmail.com sito web: www.rcmd.it - Contatto Skype: rino.ragno

Codice Fiscale: RGNRNI65H07H501X

POSIZIONE ATTUALE

Professore Associato

INFORMAZIONI ISTITUZIONALI

DATORE DI LAVORO

Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma - piazzale Aldo Moro, 5 00185 Roma, Italia

TELEFONO CELLULARE

+39 338 90 94 019

TELEFONO LAVORO

+39 (0) 6 4991 3937

TELEFONO LABORATORIO

+39 (0) 6 4991 3152

NUMERO DI FAX

+39 (0) 6 4991 3627

E-MAIL

rino.ragno@uniroma1.it

SITO WEB

https://web.uniroma1.it/dip_ctf/dipartimento/personale_dip/docenti/professori-associati/ragno-rino

ORCID

0000-0001-5399-975X

SCOPUS ID

6603057085

LINGUE CONOSCIUTE

Italiano e Inglese

POSIZIONE ATTUALE

Professore Associato

MEMBRO SOCIALE

Affiliato alla Società Chimica Italiana – Divisione di Chimica Farmaceutica

BIOSKETCH

Rino Ragno è professore associato della Facoltà di Farmacia e Medicina, Sapienza Università di Roma, dal 2010. Laureato con lode in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 1989 alla Sapienza Università di Roma. Dal 1990 al 2000 è stato Tecnico Laureato e ha svolto ricerca nel campo della sintesi chimico-farmaceutica. Durante questo tempo ha studiato anche tecniche informatiche e di chimica computazionale da applicare alla chimica farmaceutica. Nel 1996 e 1998 mediante una borsa di studio dell'Istituto Superiore di Sanità ha trascorso due anni nel "Center for Molecular Design" alla Washington University in St. Louis diretto dal Prof. G. R. Marshall acquisendo esperienza nel campo della chimica farmaceutica computazionale applicata.

Nel 1999 ha creato un nuovo laboratorio di ricerca informalmente chiamato “Rome Center for Molecular Design” (RCMD) con lo scopo di applicare metodi computazionali alla progettazione razionale in chimica farmaceutica. Dal 1991 ha pubblicato 139 articoli scientifici (di cui 135 recensiti in scopus.com) di carattere internazionale molti dei quali su riviste ad alto fattore di impatto e ha presentato oltre 140 posters/comunicazioni orali a congressi internazionali. Tra le attività più recenti e rilevanti sono da listare:

- l’apertura del portale www.3d-qsar.com, uno strumento web unico del suo genere che permette di costruire modelli 3-D QSAR Ligand-Based (CoMFA) e Structure-Based (COMBINE) e docking molecolare attraverso tutti i dispositivi elettronici in grado di “navigare” su internet. Il portale 3D QSAR è aperto a tutti.
- l’apertura di un sito contenente un database di oli essenziali ancora in perfezionamento (eo.3d-qsar.com) compilato da oltre 1000 pubblicazioni e contenente 2275 composizioni di oli essenziali associate a 976 diverse piante e a 16512 attività sperimentali. Il sito è aperto al pubblico.
- lo sviluppo di nuovi protocolli sperimentali per estrarre gli oli essenziali
- l’applicazione di algoritmi di “machine learning” sia al drug design che allo sviluppo di modelli quantitativi di composizione-attività su miscele complesse come gli oli essenziali.

Dal 2015 è stato incaricato di coordinare il gruppo tecnico dei MOOC di Sapienza Università di Roma per la produzione di nuovi corsi online. Nel maggio 2016 ha fondato una nuova start-up di cui ne è il presidente esecutivo, Alchemical Dynamics s.r.l., dedicata principalmente allo sviluppo di applicazioni informatiche nel campo della progettazione farmaceutica e dell’agri-food.

I principali campi di ricerca del Prof. Rino Ragno sono: Chimica Computazionale applicata al “Drug design”; Sviluppo di nuove tecniche QSAR and 3-D QSAR; Estrazione, analisi e caratterizzazione microbiologica di oli essenziali; Sviluppo di modelli predittivi per diversi target di interesse farmaceutico; Sviluppo di siti web scientifici.

APPUNTAMENTI ACCADEMICI

Professore Associato	
Dicembre 2010 - Presente	Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco Settore Dicipinare: Chimica Farmaceutica (CHIM08) Abilitazione Nazionale alla Prima Fascia (Prof. Ordinario) per la Chimica Farmaceutica. Risultati ASN 2016-2018 (valida dal 31/03/2017/ al 31/03/2026) settore concorsuale: Chimica e Tecnologie Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutico-Alimentari (03/D1), Settore Disciplinare Chimica farmaceutica CHIM/08
marzo 2017 – Presente	Membro del Direttivo – SIROE (www.siroe.it) SIROE: Società Italiana per la Ricerca sugli Oli Essenziali. Associazione senza scopo di lucro per la ricerca sugli oli essenziali
2017 – Presente	Presidente di Alchemical Dynamics s.r.l., una Start Up universitaria (Sapienza Università di Roma)
Maggio 2016 – Presente	2015 – Presente Coordinatore tecnico delle attività MOOC di Sapienza Università di Roma
2015 – Presente	2014 – Presente Vice-Presidente del Comitato Editoriale Web di Ateneo (CEW)
2014 – Presente	2012 – Presente Componente del Collegio dei Docenti per il Dottorato in Scienze Farmaceutiche
2012 – Presente	2001 - Presente Componente della Commissione Web di Facoltà
2001 - Presente	Settembre 2009, Settembre 2011, Settembre 2014 Professore Visitatore Laboratoire d’Ingénierie Moléculaire et Biochimie Pharmacologique chaired by Professeur Gilbert KIRSCH – Ex Université Paul Verlaine Metz - UMR CNRS 7565 SRSMC Université de Lorraine (France)
Settembre 2009, Settembre 2011, Settembre 2014	Novembre 2000 – Dicembre 2010 Ricercatore Universitario Confermato Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco

Ottobre 1990 – Novembre 2000	Tecnico Laureato Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco
Gennaio 1999 -	Coordinatore del laboratorio Rome Center for Molecular Design Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco - Sapienza Università di Roma (Piazzale Aldo Moro, 5 00185 Roma – www.uniroma1.it)
Marzo 1996 – Marzo 1997 Dicembre 1997 – Dicembre 1998	Post-Doc Center for Molecular Design - Washington University of St Louis – diretto dal prof. Garland R. Marshall.

INSEGNAMENTI

2000	Chimica Organica All'Università della Tuscia (Viterbo) al Corso di Laurea in Scienze Agrarie e Forestali
2001-2008	Chimica Farmaceutica per il Corso di Laurea Triennale in “Scienze e Tecnologie dei Prodotti Erboristici” presso Sapienza
2009-2017	Preparazioni estrattive di composti naturali per il Corso di Laurea Triennale in “Scienze Farmaceutiche Applicate” presso Sapienza
2002-2011	Laboratorio di Preparazioni Estrattive e Sintetiche dei Farmaci per il Corso di Laurea Magistrale a Ciclo Unico in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche presso Sapienza
2011-2020	Chimica Farmaceutica per il Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie presso Sapienza
2012-presente	Chimica Farmaceutica Computazionale per il Corso di Laurea Magistrale in Biotecnologie Farmaceutiche presso Sapienza
2020-presente	Chimica Farmaceutica e Tossicologica 1 per Corso di Laurea Magistrale a Ciclo Unico in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche presso Sapienza
2011-2013	Medicinal Chemistry 1 for the Master Degree in Pharmacy in Inglese presso l'Università Tor Vergata
2013-2014	Medicinal Chemistry 2 for the Master Degree in Pharmacy in Inglese presso l'Università Tor Vergata
2017-presente	Chimica Farmaceutica 3 in co-docenza per Corso di Laurea Magistrale a Ciclo Unico in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche presso Sapienza
2017-2020	Pharmaceutical Chemistry for the Bachelor Degree in Bioinformatics presso Sapienza
2017-presente	Metodi Alternativi in Chimica Farmaceutica (QSAR) per il Corso Avanzato in Valutazione e Gestione del Rischio Chimico presso Sapienza

EDUCAZIONE

Nov 1990 – Feb 1992	Laurea in Farmacia Sapienza Università di Roma (Piazzale Aldo Moro, 5 00185 Roma – www.uniroma1.it) ▪ Tesi Sperimentale sulla sintesi di nuovi composti ad attività antifungina	Master
Dic 1991	Abilitazione alla Professione di Farmacista Sapienza Università di Roma (Piazzale Aldo Moro, 5 00185 Roma – www.uniroma1.it)	Master
Nov 1985 – Nov 1989	Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche Sapienza Università di Roma (Piazzale Aldo Moro, 5 00185 Roma – www.uniroma1.it) ▪ Tesi Sperimentale sulla sintesi di nuovi composti ad attività antivirale	Bachelor + Master
Set 1980 – Giu 1985	Scuola Superiore ITIS GL Bernini Roma – Chimica Industriale	High School

ABILITÀ PERSONALI

Lingua Nativa	Italiano				
	COMPRESIONE		PARLATO		SCRITTO
Altre lingue	Ascolto	Letture	Parlato Interattivo	Parlato di Produzione	
Inglese	C1	C1	C1	C1	C1
Comunicazione	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Buona/ottima capacità comunicativa sviluppata durante il percorso formativo e lavorativo 				
Organizzazione / Direzione	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Livello leadership (attualmente responsabile di un gruppo di ricerca di oltre 10 persone) 				
Lavoro	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Buona attinenza al controllo dei processi e alla direzione 				
Informatica	Buona Conoscenza di				
	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Microsoft Office™ ▪ MS Windows Operating System ▪ MacOSX Operating System ▪ Linux Operating System ▪ Programmazione in HTML, C, bash, python ▪ Web Master 				
Altri	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Chimico Farmaceutico ▪ Progettatore di Molecole Bioattive ▪ Modellazione Molecolare ▪ E-learning (Moodle, Coursera, MOOC) 				
Licenze di Guida	<ul style="list-style-type: none"> ▪ A + B + C 				

ULTERIORI INFORMAZIONI
Seguono

Pubblicazione degli ultimi 5 anni

N	Referenza
1	Consalvi, S.; Poce, G.; Ragno, R. ; Sabatino, M.; La Motta, C.; Sartini, S.; Calderone, V.; Martelli, A.; Ghelardini, C.; Di Cesare Mannelli, L.; Biava, M., A Series of COX-2 Inhibitors Endowed with NO-Releasing Properties: Synthesis, Biological Evaluation, and Docking Analysis. <i>ChemMedChem</i> 2016 , <i>11</i> , 1804-11
2	Coluccia, A.; Passacantilli, S.; Famiglioni, V.; Sabatino, M.; Patsilidakos, A.; Ragno, R. ; Mazzoccoli, C.; Sisinni, L.; Okuno, A.; Takikawa, O.; Silvestri, R.; La Regina, G., New Inhibitors of Indoleamine 2,3-Dioxygenase 1: Molecular Modeling Studies, Synthesis, and Biological Evaluation. <i>J Med Chem</i> 2016 , <i>59</i> , 9760-9773.
3	Bozovic, M.; Garzoli, S.; Sabatino, M.; Pepi, F.; Baldisserotto, A.; Andreotti, E.; Romagnoli, C.; Mai, A.; Manfredini, S.; Ragno, R. , Essential Oil Extraction, Chemical Analysis and Anti-Candida Activity of <i>Calamintha nepeta</i> (L.) Savi subsp. <i>glandulosa</i> (Req.) Ball-New Approaches. <i>Molecules</i> 2017 , <i>22</i>
4	Mollica, A.; Pelliccia, S.; Famiglioni, V.; Stefanucci, A.; Macedonio, G.; Chiavaroli, A.; Orlando, G.; Brunetti, L.; Ferrante, C.; Pieretti, S.; Novellino, E.; Benyhe, S.; Zador, F.; Erdei, A.; Szucs, E.; Samavati, R.; Dvrorskó, S.; Tomboly, C.; Ragno, R. ; Patsilidakos, A.; Silvestri, R., Exploring the first Rimonabant analog-opioid peptide hybrid compound, as bivalent ligand for CB1 and opioid receptors. <i>J Enzyme Inhib Med Chem</i> 2017 , <i>32</i> , 444-451.
5	Nikolaos Papastavrou, Maria Chatzopoulou, Jana Ballekova, Mario Cappiello, Roberta Moschini, Francesco Balestri, Alexandros Patsilidakos, Rino Ragno , Milan Stefekb, Enhancing activity and selectivity in a series of pyrrol-1-yl-1-hydroxypyrazole-based aldose reductase inhibitors: The case of trifluoroacetylation. <i>European Journal of Medicinal Chemistry</i> , 2017 , <i>130</i> , 328-335
6	Mijat Božović and Rino Ragno <i>Calamintha nepeta</i> (L.) Savi and its Main Essential Oil Constituent Pulegone: Biological Activities and Chemistry. <i>Molecules</i> . 2017 Feb 14;22(2). pii: E290. doi: 10.3390/molecules22020290
7	Božović M, Navarra A, Garzoli S, Pepi F, & Ragno R . 24-Hour Steam Distillation Methodology For Essential Oils Extraction. <i>Natural Product Research</i> . (2017).
8	Milan Mladenovic, Alexandros Patsilidakos, Adele Pirolli, Manuela Sabatino, and Rino Ragno . Understanding the Molecular Determinant of Reversible Human Monoamine Oxidase B Inhibitors Containing 2H-chromen-2-One Core: Structure-Based and Ligand-Based Derived 3-D QSAR Predictive Models. <i>J. Chem. Inf. Model.</i> , (2017). DOI: 10.1021/acs.jcim.6b00608. Publication Date (Web): March 14, 201
9	Clemens Zwergel, PhD; Brigitte Czepukojc.; Emilie Evain-Bana, Zhanjie Xu, Giulia Stazi, Mattia Mori, Alexandros Patsilidakos, Antonello Mai, Bruno Botta, Rino Ragno , Denyse Bagrel, Gilbert Kirsch, Peter Meiser, Claus Jacob, Mathias Montenarh, Sergio Valente. Novel Coumarin- and Quinolinone-Based Polycycles as Cell Division Cycle 25-A and -C Phosphatases Inhibitors Induce Proliferation Arrest and Apoptosis in Cancer Cells. <i>European Journal of Medicinal Chemistry</i> , 2017
10	Antonella Di Sotto, Ph.D.; Silvia Di Giacomo. Lorena Abete; Mijat Božović ; Olga A Parisi; Fabio Barile ; Annabella Vitalone; Angelo A Izzo; Rino Ragno ; Gabriela Mazzanti. Genotoxicity assessment of piperitenone oxide: an in vitro and in silico evaluation. <i>Food Microbiology</i> . 2017
11	Diego Muñoz-Torrero, Arduino A. Mangoni, Catherine Guillou, Simona Collina, Jean Jacques Vanden Eynde, Jarkko Rautio, György M. Keserű, Christopher Hulme, Kelly Chibale, F. Javier Luque, Rafik Karaman, Michael Gütschow, Hong Liu and Rino Ragno . Breakthroughs in Medicinal Chemistry: New Targets and Mechanisms, New Drugs, New Hopes. <i>Molecules</i> 2017 , <i>22</i> (5), 743
12	Stefania Garzoli, Mijat Božović, Anna Baldisserotto, Manuela Sabatino, Stefania Cesa, Federico Pepi, Chiara Beatrice Vicentini, Stefano Manfredini and Rino Ragno . Essential Oil Extraction, Chemical Analysis and Anti-Candida Activity of <i>Foeniculum vulgare</i> Miller – New Approaches. <i>Natural Product Research</i> . (2017)
13	Alessandro Venditti, Claudio Frezza, Giulia Salutari, Mirella di Cecco, Giampiero Ciaschetti, Alessandra Oliva, Massimiliano De Angelis, Vincenzo Vullo, Manuela Sabatino, Stefania Garzoli, Federico Pepi, Rino Ragno , Mauro Serafini, Armando I

-
- doriano Bianco. Composition of the Essential Oil of *Coristospermum cuneifolium* and Antimicrobial Activity Evaluation. *Planta Med Int Open* **2017**
-
- 14 Vanja Tadić, Alessandra Oliva, Mijat Božović, Alessia Cipolla, Massimiliano De Angelis, Vincenzo Vullo, Stefania Garzoli and **Rino Ragno**. Chemical and antimicrobial analyses of *Sideritis romana* L. subsp. *purpurea* (Tal. ex Benth.) Heywood, an endemic of the Western Balkan. *Molecules* **2017**
-
- 15 Stefania Garzoli, Mijat Božović, Anna Baldisserotto, Elisa Andreotti, Federico Pepi, Vanja Tadić, Stefano Manfredini and **Rino Ragno**. *Sideritis romana* L. subsp. *purpurea* (Tal. ex Benth.) Heywood, a new chemotype from Montenegro. *Natural Product Research*, **2017**. Accepted (07-Sep-2017)
-
- 16 Simone Carradori, Bruna Bizzarri, Melissa D'Ascenzio, Celeste De Monte, Rossella Grande, Daniela Rivanera, Alessanda Zicari, Emanuela Mari, Manuela Sabatino, Alexandros Patsilnakos, **Rino Ragno**, Daniela Secci. Synthesis, Biological Evaluation and Quantitative Structure-Active Relationships of 1,3-thiazolidin-4-one Derivatives. A Promising Chemical Scaffold Endowed with High Antifungal Potency and Low Cytotoxicity. *European Journal of Medicinal Chemistry*, **2017**. Accepted (15-Sep-2017)
-
- 17 Stefania Garzoli, Mijat Božović, Anna Baldisserotto, Elisa Andreotti, Federico Pepi, Vanja Tadić, Stefano Manfredini & **Rino Ragno**. *Sideritis romana* L. subsp. *purpurea* (Tal. ex Benth.) Heywood, a new chemotype from Montenegro. *Nat Prod Res.* **2017** Sep 19:1-6. doi: 10.1080/14786419.2017.1378212. [Epub ahead of print]
-
- 18 Diego Muñoz-Torrero, Arduino A. Mangoni, Hong Liu, Christopher Hulme, Jarkko Rautio, Rafik Karaman, Maria Emília de Sousa, Katalin Prokai-Tatrai, Jean-Marc Sabatier, Carlo Siciliano, F. Javier Luque, George Kokotos, **Rino Ragno**, Simona Collina, Catherine Guillou, Michael Gütschow and Luigi A. Agrofoglio. *Molecules* **2018**, 23(1), 65; doi:10.3390/molecules23010065
-
- 19 Manuela Sabatino, Dante Rotili, Alexandros Patsilnakos, Mariantonietta Forgiione, Daniela Tomaselli, Frédéric Alby, Paola B. Arimondo, Antonello Mai, **Rino Ragno**. *J Comput Aided Mol Des* (2018). <https://doi.org/10.1007/s10822-018-0096-z>
-
- 20 Alessandra Masci, Simone Carradori, Maria Antonietta Casadei, Patrizia Paolicelli, Stefania Petralito, **Rino Ragno**, Stefania Cesa. *Lycium barbarum* polysaccharides: Extraction, purification, structural characterisation and evidence about hypoglycaemic and hypolipidaemic effects. A review. *Food Chemistry* (2018)
-
- 21 L. Antonini, S. Garzoli, A. Ricci, A. Troiani, C. Salvitti, P. Giacomello, **R. Ragno**, A. Patsilnakos, B. Di Rienzo and F. Pepi. Ab-initio and experimental study of pentose sugar dehydration mechanism in the gas phase. *Carbohydrate Research* 458-459 (2018) 19-28
-
- 22 Marco Artini, Alexandros Patsilnakos, Rosanna Papa, Mijat Božović, Manuela Sabatino, Stefania Garzoli, Gianluca Vrenna, Marco Tilotta, Federico Pepi, **Rino Ragno** and Laura Selan. Antimicrobial and antibiofilm activity and machine learning classification analysis of essential oils from different Mediterranean plants against *Pseudomonas aeruginosa*. *Molecules* (2018)
-
- 23 Dr. Vincenzo Carafa, Angela Nebbioso, Francesca Cuomo, Dr. Dante Rotili, Dr. Gilda Cobellis, Dr. Paola Bontempo, Dr. Baldi Alfonso, Dr. Enrico P Spugnini, Dr. Gennaro Citro, Dr. Angela Chambery, Dr. Rosita Russo, Dr. Menotti Ruvo, Dr. Paolo Ciana, Dr. Luca Maravigna, Dr. Jani Shaik, Dr. Enrico Radaelli, Dr. Pasqualino De Antonellis, Dr. Domenico Tarantino, Dr. Adele Pirolli, **Dr. Rino Ragno**, Dr. Massimo Zollo, Dr. Hendrik G. Stunnenberg, Dr. Antonello Mai. RIP1-HAT1-SirT complex identification and targeting in treatment and prevention of cancer. *Clinical Cancer Research* MS# CCR-17-3081R (2018)
-
- 24 Mijat Božović, Stefania Garzoli, Anna Baldisserotto, Elisa Andreotti, Federico Pepi, Stefania Cesa, Silvia Vertuani, Stefano Manfredini and **Rino Ragno**. *Melissa officinalis* L. subsp. *altissima* (Sibth. & Sm.) Arcang. Essential Oil: Chemical Composition and Preliminary Antimicrobial Investigation of Samples Obtained at Different Harvesting Periods and by Fractionated Extractions. *Industrial Crops and Products* (2018)
-
- 25 Alexandros Patsilnakos, **Rino Ragno**, Simone Carradori, Stefania Petralito, Stefania Cesa. Carotenoid content of Goji berries: CIELAB, HPLC-DAD analyses and quantitative correlation. *Food Chemistry* (2018)
-

- 26 Mijat Božović, Stefania Garzoli, Anna Baldisserotto, Elisa Andreotti, Stefania Cesa, Federico Pepi, Silvia Vertuani, Stefano Manfredini & **Rino Ragno**. Variation in Essential Oil Content and Composition of *Ridolfia segetum* Moris based on 30-hour Prolonged Fractionated Extraction Procedure. (ID: 1561688 DOI:10.1080/14786419.2018.1561688). Journal: *Natural Product Research* (2019)
- 27 Arduino A Mangoni, Catherine Guillou, Jean Jacques Vanden Eynde, Christopher Hulme, Josef Jampilek, Wei Li, Katalin Prokai-Tatrai, Jarkko Rautio, Simona Collina, Tiziano Tuccinardi, Maria Emilia de Sousa, Jean-Marc Sabatier, Stefania Galdiero, Rafik Karaman, George Kokotos, Giangiacomo Torri, F. Javier Luque, M. Helena Vasconcelos, Dimitra Hadjipavlou-Litina, Carlo Siciliano, Michael Gütschow, **Rino Ragno**, Paula A. C. Gomes and Diego Muñoz-Torrero. Breakthroughs in Medicinal Chemistry: New Targets and Mechanisms, New Drugs, New Hopes-4. *Molecules* 2019, 24, 130; doi:10.3390/molecules24010130
- 28 Nawrozkij Maxim, Forgione Mariantonietta, Yablokov Alexandre, Lucidi Alessia, Tomaselli Daniela, Patsilinakos Alexandros, Panella Cristina, Hailu Gebremedhin, Kirillov Ivan, Badia Roger, Riveira Muñoz Eva, Crespan Emmanuele, Armijos-Rivera Jorge, Cirilli Roberto, **Ragno Rino**, Este Jose, Maga Giovanni, Mai Antonello, Rotili Dante. Effect of α -Methoxy Substitution on the anti-HIV Activity of Dihydropyrimidin-4(3H)-ones". *J. Med. Chem* (2019)
- 29 G. Stazi, C. Battistelli, V. Piano, R. Mazzone, B. Marrocco, S. Marchese, S.M. Louie, C. Zwergel, L. Antonini, A. Patsilinakos, **R. Ragno**, M. Viviano, G. Sbardella, A. Ciogli, G. Fabrizi, R. Cirilli, R. Strippoli, A. Marchetti, M. Tripodi, D.K. Nomura, A. Mattevi, A. Mai, S. Valente, Development of alkyl glycerone phosphate synthase inhibitors: Structure-activity relationship and effects on ether lipids and epithelial-mesenchymal transition in cancer cells, *European Journal of Medicinal Chemistry* (2019), doi: <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2018.11.050>
- 30 Alessandra Oliva, Stefania Garzoli, Massimiliano De Angelis, Carolina Marzuillo, Vincenzo Vullo, Claudio M. Mastroianni and **Rino Ragno**. In-Vitro Evaluation of Different Antimicrobial Combinations with and without Colistin Against Carbapenem-Resistant *Acinetobacter Baumannii*. *Molecules* 2019, 24(5), 886; <https://doi.org/10.3390/molecules24050886>
- 31 Alexandros Patsilinakos, Marco Artini, Rosanna Papa, Manuela Sabatino, Mijat Božović, Stefania Garzoli, Gianluca Vrenna, Raissa Buzzi, Stefano Manfredini, Laura Selan and **Rino Ragno**. Machine Learning Analyses on Data including Essential Oil Chemical Composition and In Vitro Experimental Antibiofilm Activities against *Staphylococcus* Species. *Molecules* 2019, 24(5), 890; <https://doi.org/10.3390/molecules24050890>
- 32 Mangoni, A.A., Eynde, J.J.V., Jampilek, J., Hadjipavlou-Litina, D., Liu, H.f, Reynisson, J., Sousa, M.E., Gomes, P.A.C., Prokai-Tatrai, K., Tuccinardi, T., Sabatier, J.-M., Luque, F.J., Rautio, J., Karaman, R., Vasconcelos, M.H., Gemma, S., Galdiero, S., Hulme, C., Collina, S., Gütschow, M., Kokotos, G., Siciliano, C., Capasso, R., Agrofoglio, L.A., **Ragno, R.**, Muñoz-Torrero, D. Breakthroughs in medicinal chemistry: New targets and mechanisms, *New Drugs, New Hopes-5. Molecules* 2019, 24(13), 2415. DOI: 10.3390/molecules24132415
- 33 Ilaria Marrocco, Fabio Altieri, Elisabetta Rubini, Giuliano Paglia, Silvia Chichiarelli, Flavia Giamogante, Alberto Macone, Giacomo Perugia, Fabio Massimo Magliocca, Aymone Gurtner, Bruno Maras, **Rino Ragno**, Alexandros Patsilinakos, Roberto Manganaro and Margherita Eufemi. Shmt2: A Stat3 Signaling New Player in Prostate Cancer Energy Metabolism. *Cells* 2019, 8(9), 1048; <https://doi.org/10.3390/cells8091048>
- 34 **Rino Ragno**. www.3d-qsar.com. A Web Portal that Brings 3-D QSAR to All Electronic Devices. The Py-CoMFA Web Application as Tool to Build Models from Pre-Aligned Datasets. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, (2019) 33:855-864. <https://doi.org/10.1007/s10822-019-00231-x>
- 35 Giulia Stazi, Ludovica Taglieri, Alice Nicolai, Annalisa Romanelli, Rossella Fioravanti, Stefania Morrone, Manuela Sabatino, **Rino Ragno**, Samanta Taurone, Marcella

-
- Nebbioso, Raffaella Carletti, Marco Artico, Sergio Valente, Susanna Scarpa and Antonello Mai. Dissecting the role of novel EZH2 inhibitors in primary glioblastoma cell cultures: effects on proliferation, epithelial-mesenchymal transition, migration, and on the pro-inflammatory phenotype. *Clinical Epigenetics* volume 11, Article number: 173 (2019)
-
- 36 Stefania Garzoli, Lorenzo Antonini, Anna Troiani, Chiara Salvitti, Pierluigi Giacomello, Alexandros Patsilidakos, **Rino Ragno**, Federico Pepi. Gas-phase structures and thermochemical properties of protonated 5-HMF isomers. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2020, <https://doi.org/10.1016/j.ijms.2019.116237>
-
- 37 Nobile, V., Palumbo, F., Lanni, S., Ghisio, Vc, Vitali, A., Castagnola, M., Marzano, V., Maulucci, G., De Angelis, C., De Spirito, M., Pacini, L., D'Andrea, L., **Ragno, R.**, Stazi, G., Valente, S., Mai, A., Chiurazzi, P., Genuardi, M., Neri, G., Tabolacci, E. Altered mitochondrial function in cells carrying a premutation or unmethylated full mutation of the FMR1 gene. *Human Genetics*, Volume 139, Issue 2, 1 February 2020, Pages 227-245
-
- 38 Alessandra Oliva, Stefania Garzoli, Manuela Sabatino, Vanja Tadić, Silvia Costantini, **Rino Ragno** and Mijat Božović. Chemical Composition and Antimicrobial Activity of Essential Oil of *Helichrysum italicum* (Roth) G. Don fil. (Asteraceae) from Montenegro. *Nat Prod Res.* 2020 Feb;34(3):445-448. doi: 10.1080/14786419.2018.1538218
-
- 39 Vanden Eynde, J.J., Mangoni, A.A., Rautio, J., Leprince, J., Azuma, Y.-T., García-Sosa, A.T., Hulme, C., Jampilek, J., Karaman, R., Li, W., Gomes, P.A.C., Hadjipavlou-Litina, D., Capasso, R., Geronikaki, A., Cerchia, L., Sabatier, J.-M., **Ragno, R.**, Tuccinardi, T., Trabocchi, A., Winum, J.-Y. Breakthroughs in medicinal chemistry: New targets and mechanisms, new drugs, new hopes-6. *Molecules*. Volume 25, Issue 1, 2020, Article number 119
-
- 40 **Rino Ragno**, Rosanna Papa, Alexandros Patsilidakos, Gianluca Vrenna, Stefania Garzoli, Vanessa Tuccio, Ersilia Vita Fiscarelli, Laura Selan, and Marco Artini. Essential oils against bacterial isolates from cystic fibrosis patients by means of antimicrobial and unsupervised machine learning approaches. *Sci Rep.* 2020 Feb 14;10(1):2653. doi: 10.1038/s41598-020-59553-8.
-
- 51 Silvia Caroselli, Clemens Zwergel, Adele Pirolli, Manuela Sabatino, Zhanjie Xu, Gilbert Kirsch, Antonello Mai, Gianni Colotti, Fabio Altieri, Rita Canipari, Sergio Valente, **Rino Ragno**. Discovery of the First Human Arylsulfatase A Reversible Inhibitor Impairing Mouse Oocyte Fertilization, 2020, <https://doi.org/10.1021/acscchembio.9b00999>
-
- 52 Tanira Matutino Bastos, Milena Botelho Pereira Soares, Caio Haddad Franco, Laura Alcântara, Lorenzo Antonini, Manuela Sabatino, Nicola Mautone, Lucio Holanda Freitas Junior, Carolina Borsoi Moraes, **Rino Ragno**, Dante Rotili, Sergio Schenkman, Antonello Mai and Nilmar Silvio Moretti. Identification of Inhibitors to *Trypanosoma cruzi* Sirtuins Based on Compounds Developed to Human Enzymes. *Int. J. Mol. Sci.* 2020, 21, 3659. DOI: <https://doi.org/10.3390/ijms21103659>
-
- 53 Maura Di Vito, Maria Grazia Bellardi, Maurizio Sanguinetti, Francesca Mondello, Antonietta Girolamo, Lorenzo Barbanti, Stefania Garzoli, Manuela Sabatino, **Rino Ragno**, Alberto Vitali, Ivana Palucci, Brunella Posteraro, Antonio Gasbarrini, Gian Maria Prati, Giovanni Aragona, Paola Mattarelli and Francesca Bugli. Potent in vitro activity of *Citrus aurantium* essential oil and *Vitis vinifera* hydrolate against gut yeast isolates from irritable bowel syndrome patients: the right mix for potential therapeutic use. *Nutrients* 2020, 12, 1239; doi: <https://doi.org/10.3390/nu12051329>
-
- 54 Manuela Sabatino, Marco Fabiani, Mijat Bozovic, Stefania Garzoli, Lorenzo Antonini, Maria Elena Marcocci, Anna Teresa Palamara, Giovanna De Chiara, **Rino Ragno**. Experimental Data Based Machine Learning Classification Models with Predictive Ability to Select in-vitro Active Antiviral and Non-Toxic Essential Oils. *Molecules* 2020, 25, 2452. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules25102452>
-
- 55 **Ragno, Rino**; Esposito, Valeria; Di Mario, Martina; Masiello, Stefano; Viscovo, Marco; Cramer, Richard. Teaching and Learning Computational Drug Design: Student Investigations of 3D Quantitative Structure–Activity Relationships through Web
-

- Applications. *The Journal of Chemical Education*, **2020**. DOI: 10.1021/acs.jchemed.0c00117
-
- 56** Michael Gütschow, Jean Jacques Vanden Eynde, Josef Jampílek, CongBao Kang, Arduino A. Mangoni, Paola Fossa, Rafik Karaman, Andrea Trabocchi, Peter J. H. Scott, Jóhannes Reynisson, Simona Rapposelli, Stefania Galdiero, Jean-Yves Winum, Chiara Brullo, Katalin Prokai-Tatrai, Arun K. Sharma, Matthieu Schapira, Yasu-Taka Azuma, Laura Cerchia, Mariana Spetea, Giangiacomo Torri, Simona Collina, Athina Geronikaki, Alfonso T. García-Sosa, Maria Helena Vasconcelos, Maria Emília Sousa, Ivan Kosalec, Tiziano Tuccinardi, Iola F. Duarte, Jorge A. R. Salvador, Massimo Bertinaria, Maurizio Pellecchia, Jussara Amato, Giulio Rastelli, Paula A. C. Gomes, Rita C. Guedes, Jean-Marc Sabatier, Ana Estévez-Braun, Bruno Pagano, Stefano Mangani, **Rino Ragno**, George Kokotos, Margherita Brindisi, Florenci V. González, Fernanda Borges, Mariarosaria Miloso, Jarkko Rautio and Diego Muñoz-Torrero. Breakthroughs in medicinal chemistry: New targets and mechanisms, new drugs, new hopes-7. *Molecules*. **2020** ??????????
-
- 57** Rinaldi, F.; Oliva, A.; Sabatino, M.; Imbriano, A.; Hanieh, P.N.; Garzoli, S.; Mastroianni, C.M.; De Angelis, M.; Miele, M.C.; Arnaut, M.; Di Timoteo, F.; Marianecchi, C.; **Ragno, R.**; Carafa, M. Antimicrobial Essential Oil Formulation: Chitosan Coated Nanoemulsions for Nose to Brain Delivery. *Pharmaceutics* **2020**, 12, 678.
-
- 58** Boriero, Diana, Carcereri de Prati, Alessandra; Antonini, Lorenzo; **Ragno, Rino**, Shoji, Kazuo, MARIOTTO, Sofia Giovanna, Butturini, Elena. The anti-STAT1 polyphenol myricetin inhibits M1 microglia activation and counteracts neuronal death. *FEBS* **2020**
-
- 59** Marta Di Martile, Stefania Garzoli, **Rino Ragno** and Donatella Del Bufalo. Essential oils and their main chemical components: 3 the past 20 years of preclinical studies in melanoma. *Cancers* **2020** ??????.
-
- 60** Rosanna Papa, Stefania Garzoli, Gianluca Vrenna, Manuela Sabatino, Filippo Sapienza, Michela Relucenti, Orlando Donfrancesco, Ersilia Vita Fiscarelli, Marco Artini, Laura Selan, **Rino Ragno**. Essential Oils Biofilm Modulation Activity, Chemical and Machine Learning Analysis. Application on *Staphylococcus aureus* Isolates from Cystic Fibrosis Patients. *Int J Mol Sci*, **2020** Dec 4;21(23):9258. doi: 10.3390/ijms21239258
-
- 61** Di Martile M., Garzoli, Sabatino M., Valentini E., D'Aguzzo S., **Ragno R.**, Del Bufalo D. Antitumor effect of Melaleuca alternifolia essential oil and its main component terpinen-4-ol in combination with target therapy in melanoma models. *Cell Death Discovery*, Volume 7, Issue 1 June **2021** Article number 127
-
- 62** Boriero D., Carcereri de Prati A., Antonini L., **Ragno R.**, Sohji K., Mariotto S.a, Butturini E. The anti-STAT1 polyphenol myricetin inhibits M1 microglia activation and counteracts neuronal death. *FEBS Journal* Volume 288, Issue 7, Pages 2347 – 2359 April **2021**
-
- 63** Mihovic N., Tomasevic N., Matic S., Mitrovic M.M., Kostic D.A., Sabatino M., Antonini L., Ragno R., Mladenovic M. Human Estrogen Receptor α Antagonists. Part 1: 3-D QSAR-Driven Rational Design of Innovative Coumarin-Related Antiestrogens as Breast Cancer Suppressants through Structure-Based and Ligand-Based Studies. *Journal of Chemical Information and Modeling*. **2021**. 61, 10,
-
- 64** Vrenna G., Artini M., Ragno R., Relucenti M., Fiscarelli E.V., Assanti V.T.G., Papa R., Selan L. Anti-virulence properties of coridothymus capitatus essential oil against pseudomonas aeruginosa clinical isolates from cystic fibrosis patients. *Microorganisms*. **2021**. 9, 11.
-
- 65** Paglia G., Antonini L., Cervoni L., Ragno R., Sabatino M., Minacori M., Rubini E., Altieri F. A comparative analysis of punicalagin interaction with PDIA1 and PDIA3 by biochemical and computational approaches. *Biomedicines*. **2021**. 9, 11.
-
- 66** Kurtanovic N., Tomasevic N., Matic S., Mitrovic M.M., Kostic D.A., Sabatino M., Antonini L., Ragno R., Mladenovic M. Human estrogen receptor α antagonists, part 2: Synthesis driven by rational design, in vitro antiproliferative, and in vivo anticancer evaluation of innovative coumarin-related antiestrogens as breast cancer suppressants. *European Journal of Medicinal Chemistry*. **2022**. 227
-
- 67** Elisabetta Valentini, Simona D'Aguzzo, Marta Di Martile, Camilla Montesano, Virginia Ferraresi, Alexandros Patsilinos, Manuela Sabatino, Lorenzo Antonini,

Sergio Valente, Antonello Mai, Gianni Colotti, Rino Ragno, Daniela Trisciuglio, Donatella Del Bufalo. Targeting the anti-apoptotic Bcl-2 family proteins: machine learning virtual screening and biological evaluation of new small molecules. *Theranostics* 2021; doi:10.7150/thno.64233; accepted

Presentazioni Orali a Conferenze
(Ultimi 5 anni)

1. XXIII National Meeting on Medicinal Chemistry. Salerno 2015
2. IV Congresso Nazionale dell'Associazione Scientifica S.I.R.O.E. Roma, 25-26 novembre 2016
3. Giornata Formativa SIROE sugli Oli Essenziali. Sapienza, Roma 8 settembre 2017
4. NanoInnovation 2018 Conference & Exhibition Rome, 11-14 September
5. The 22nd European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationships EuroQSAR 2018 September 2018 16 – 20 Thessaloniki, Greece
6. 2nd Molecules Medicinal Chemistry Symposium (MMCS): Facing Novel Challenges in Drug Discovery, Barcelona, Spain, 15–17 May 2019
7. 2nd Global Summit on Dermatology and Cosmetology Edinburgh, Scotland September 09-10, 2019
8. COST CM1406 Epigenetic Chemical Biology Scientific Workshop, 18-20 February 2019 Campus de Gambelas, University of Algarve, Faro, Portugal
9. Repositioning Natural Products in Drug Discover, FRIDAY, JANUARY 17th, 2020. University of Modena and Reggio Emilia
10. Invited for the plenary lecture at the 57th Meeting of the Serbian Chemical Society (scheduled for October 02-03 June 2020 and postponed to June 18-19 2021 as an online meeting)

ERASMUS Teaching Mobility

- ✓ 2016: Laboratoire d'Ingénierie Moléculaire et Biochimie Pharmacologique – Ex Université Paul Verlaine Metz - UMR CNRS 7565 SRSMC Université de Lorraine (France)
- ✓ 2017: Laboratoire d'Ingénierie Moléculaire et Biochimie Pharmacologique – Ex Université Paul Verlaine Metz - UMR CNRS 7565 SRSMC Université de Lorraine (France)
- ✓ 2018: Laboratoire d'Ingénierie Moléculaire et Biochimie Pharmacologique – Ex Université Paul Verlaine Metz - UMR CNRS 7565 SRSMC Université de Lorraine (France)
- ✓ 2019: Laboratoire d'Ingénierie Moléculaire et Biochimie Pharmacologique – Ex Université Paul Verlaine Metz - UMR CNRS 7565 SRSMC Université de Lorraine (France)
- ✓ 2019: University of Barcelona (ES) – Pharmacy Faculty
- ✓ 2019: King's College of London (UK) – Pharmacy Faculty
- ✓ 2019: University of Motenegro (MN) – Science Faculty
- ✓ 2020: University of East Anglia (UK) – Pharmacy Faculty

Premi

- 2005: Divisione di Chimica Farmaceutica della SCI Premio per la Ricerca in Chimica Farmaceutica

Recenti Finanziamenti come "Principal Investigator"

- Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca: PRIN 2017 (141.100 euro/tre anni 2019-2022) "Class IIa HDACs as therapeutic targets in human diseases: new roles and new selective inhibitors".
- European commission: Modernizing and Enhancing Indian E Learning Educational Strategies "MIELES". (573708-EPP-1-2016-1ES-EPPKA2-CBHE-JP) (45915 euro/three years 2017-2020)
- Ricerca per privati: Sultan srl and CIMAR srl per lo sviluppo di metodi innovativi per la dechlorazione delle acque (2018-2021 -100.000 euro)
- Ricerche di Ateneo 2018: 12000 euro/anno
- Ricerche di Ateneo 2019: 14.500 euro/ anno
- Ricerche di Ateneo 2020: 13.000 euro/ anno
- Ricerche di Ateneo 2020:: 3000 euro per l'organizzazione di un congresso

Organizzazione
 Conferenze/Partecipazione a Comitati
 Scientifici

1. 22° National Meeting on Medicinal Chemistry (Molecules Journal). Roma 10-13 Settembre 2013 (<https://mmcs2022.sciforum.net/>)
2. Free Drupal Global Training Day - Venerdì 5 Febbraio 2016. Sapienza Università di Roma
3. Drupal Day 2017. 3-4 marzo 2017. Sapienza Università di Roma
4. Giornata Formativa SIROE sugli Oli Essenziali. Roma – Sapienza Università di Roma, 8 settembre 2017
5. Moodle MOOT Ita 2017. Roma – Sapienza Università di Roma, 28-30 settembre 2017
6. Member of CDA – SIROE
7. 3rd MMCS: “Shaping Medicinal Chemistry for the New Decade” 16–18 Feb 2022, Rome, Italy, Inizialmente previsto per il 2021 ma poi rinviato per l'emergenza COVID19

Libri e Capitoli di libro

1. Garland Marshall, Richard Head and Rino Ragno Affinity Prediction: The Sine Qua Non. Thermodynamics in Biology, Enrico di Cera, Editor, Oxford University Press. 87-111. 2000.
2. Rino Ragno. Tecniche di Screening per i nuovi farmaci. Alla ricerca del farmaco perduto, Carlo Tomino, Medi Service 2010, ISBN: 8890545925, ISBN-13: 9788890545924.
3. Ragno, R. Structure-Based Modeling of Histone Deacetylases Inhibitors. Epi-Informatics: Discovery and Development of Small Molecule Epigenetic Drugs and Probes. (2016) pp. 155-212. <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84969722024&partnerID=40&md5=7e3020d6066e9a74a980146e42febd9f>
4. Milan Mladenović, Rino Ragno, Nevena Stanković, Nezirina Mihović, “RACIONALNI DIZAJN BIOAKTIVNIH JEDINJENjA: Od teorijskog do praktičnog pristupa”, (“RATIONAL DESIGN OF BIOACTIVE COMPOUNDS: From theoretical to practical approach”) ISBN: 978-86-6009-054-8

Brevetti

1. Mentha suaveolens essential oil and therapeutic activities thereof By Angiolella, Letizia; Ragno, Rino From Ital. (2013), IT 1398185 B1 20130214. | Language: Italian, Database: CAPLUS
2. Mentha suaveolens essential oil and therapeutic activities thereof By Angiolella, Letizia; Ragno, Rino From PCT Int. Appl. (2011), WO 2011092655 A2 20110804. | Language: English, Database: CAPLUS
3. Three-dimensional structure-based modeling predicting target selectivity in drug design By Ragno, Rino; Marshall, Garland R.; Ballante, Flavio From PCT Int. Appl. (2015), WO 2015002860 A1 20150108. | Language: English, Database: CAPLUS

Informazioni Bibliometriche

- Scopus (14/09/2021)
- Total Papers 136
 - H-Index: 35
 - Total Citations: 3466

Attività Editoriali

1. Editor Accademico per la rivista scientifica Molecules (<http://www.mdpi.com/journal/molecules>)
2. A Editor Accademico per la rivista scientifica International Journal of Molecular Science (<http://www.mdpi.com/journal/ijms>)

Revisore di Riviste Scientifiche

1. Revisore per riviste del settore della Chimica Farmaceutica
 - J. Med. Chem.
 - ACS Med. Chem. Lett.
 - European J. Med Chem.
 - Bioorg. Med. Chem.
 - Bioorg. Med. Chem. Lett.
 - Current Pharmaceutical Design
 - Medicinal Chemistry
 - Molecules
 - Journal of Pharmacy and Pharmacology
 - Medicinal Research Reviews
 - European Journal of Pharmaceutical Sciences
 - Journal Of Enzyme Inhibition And Medicinal Chemistry
 - Medicinal Research Reviews
 - Cancers
 - LETTERS IN DRUG DESIGN & DISCOVERY
 - CheMedChem
 - Medicinal Chemistry Communications
2. Revisore per riviste del settore Della Chemoinformatica
 - Journal of Chemical Information and Modeling
 - Bioinformatics
 - Journal of Molecular Graphics and Modelling
 - Molecular Informatics
 - Journal of Molecular Modeling
 - Journal of Computational Chemistry
 - Journal of Computer-Aided Molecular Design
 - PROTEINS: Structure, Function, and Bioinformatics
 - Chemical Biology & Drug Design
3. Revisore per riviste del settore di di composti di origine naturale
 - Natural Product Research
 - Industrial Crops and Products
 - Plants
4. Revisore per riviste dei settori Biologico e Chimico generici
 - Nucleic Acids Research
 - The Journal of Physical Chemistry
 - FEBS Journal
 - Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers

Rome 14 Settembre 2021

Rino Ragno

