

ALLEGATO E AL VERBALE N. 3  
GIUDIZI INDIVIDUALI E COLLEGIALI SU TITOLI E PUBBLICAZIONI

**PROCEDURA SELETTIVA DI CHIAMATA PER N. 1 POSTO DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA B PER IL SETTORE CONCORSUALE 03/D1 - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM/08 - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA E TECNOLOGIE DEL FARMACO DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.R. N. 2536/2019 DEL 09-08-2019**

L'anno 2020, il giorno 19 del mese di marzo in Roma si è riunita per via telematica la Commissione giudicatrice della procedura selettiva di chiamata per n. 1 posto di Ricercatore a tempo determinato di tipologia B per il Settore concorsuale 03/D1 - Settore scientifico-disciplinare CHIM/08 - presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.R n. 81/2020 del 13-01-2020 e composta da:

- Prof. Romano Silvestri – professore ordinario presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Presidente;
- Prof.ssa Luciana Marinelli – professore ordinario presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università degli Studi di Napoli "Federico II", Componente;
- Prof.ssa Paola Conti – professore associato presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università degli Studi di Milano; Segretario.

I componenti della Commissione Prof.ssa Luciana Marinelli e Prof.ssa Paola Conti sono collegati per via telematica. Il collegamento avviene per e-mail e via skype.

La Commissione prende atto dei titoli per i quali sia stata presentata idonea documentazione ai sensi dell'art. 3 del bando.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 11:00 del 20 marzo 2020 e procede ad elaborare la valutazione individuale e collegiale dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati.

**CANDIDATO: ANTONIO COLUCCIA**

COMMISSARIO 1 - Prof. ROMANO SILVESTRI

TITOLI

Valutazione sui titoli

Il dott. ANTONIO COLUCCIA ha conseguito il Dottorato di ricerca in Scienze Pasteuriane nel 2008. Successivamente ha svolto un biennio di formazione all'estero presso la Welsh School of Pharmacy di Cardiff (UK). Ha usufruito di un borsa di studio biennale per ricerche in Italia dell'Istituto Pasteur - Fondazione Cenci Bolognetti e di assegni di ricerca con bando di concorso 2012 e 2014 dell'Università La Sapienza. Dal 2015 è Ricercatore a tempo determinato di tipologia A (3+2) per il settore concorsuale 03/D1 - settore scientifico-disciplinare CHIM/08 - presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Nel 2017 ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale per il Settore concorsuale 03/D1, Chimica e tecnologie farmaceutiche, tossicologiche e nutraceutico-alimentari. Il candidato svolge attività didattica con intensità e continuità nell'ambito della chimica farmaceutica dal 2012, in corsi d'insegnamento pienamente attinenti il SSD CHIM/08 oggetto della presente procedura. Dall'a.a. 2015-2016 è docente di Analisi Chimico Farmaceutica e Tossicologica I con Laboratorio (12 CFU) presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Facoltà di Farmacia e Medicina, Sapienza Università di Roma. Dal 2019 è docente del corso di Terapie delle Malattie del SNC: aspetti chimico farmaceutici della Scuola di Specializzazione in Farmacia Ospedaliera. Inoltre, egli partecipa come commissario alle commissioni esaminatrici dei corsi di Chimica farmaceutica e

tossicologica I (Farmacia) e II (Scienze farmaceutiche applicate). Il candidato ha preso parte a vari progetti di ricerca che sono stati finanziati; per uno di essi è stato Responsabile di progetto. Egli ha partecipato a convegni nel campo della chimica farmaceutica sia come relatore che come organizzatore. Egli è co-inventore di un brevetto europeo. Complessivamente i titoli del candidato appaiono di ottimo livello, pienamente congruenti per continuità e intensità con le declaratorie del Settore Concorsuale 03/D1 e con le tematiche del Settore Scientifico Disciplinare CHIM/08.

#### PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. Coluccia A, La Regina G, Naccarato V, Nalli M, Orlando O, Biagioni S, De Angelis ML, Baiocchi M, Gautier C, Gianni S, Di Pastena F, Di Magno L, Canettieri G, Coluccia AML, Silvestri R. Drug Design and Synthesis of First in Class PDZ1 Targeting NHERF1 Inhibitors as Anticancer Agents. ACS Journal Medicinal Chemistry Letters, 2019, 10, 499-503. IF 2018 = 3.794; Citations: 0. ISSN: 1948-5875, American Chemical Society, Washington, USA. **Valutazione: Eccellente.** *Il manoscritto riporta l'applicazione di tecniche di structure-based virtual screening allo scopo di identificare modulatori competitivi del dominio PDZ1 di NHERF1 come potenziali agenti antitumorali. La valutazione biologica ha confermato la bontà dell'approccio seguito. Il lavoro è coerente con le declaratorie del Settore Concorsuale 03/D1. Sono apprezzabili originalità e rigore metodologico. La progettazione e svolgimento della parte di molecular modelling è ascrivibile al candidato.*
2. Laudette M, Coluccia A, Sainte-Marie Y, Solari A, Fazal L, Sicard P, Silvestri R, Mialet-Perez J, Pons S, Ghaleh B, Blondeau, JP, Lezoualc'h F. Identification of a pharmacological inhibitor of Epac1 that protects the heart against acute and chronic models of cardiac stress. Cardiovascular Research. 2019, 115, 1766-1777. IF 2018 = 6.290; Citations: 0. ISSN: 1755-3245, Oxford University Press, Oxford, UK, **Valutazione: Eccellente.** *Il lavoro riporta l'identificazione, mediante un approccio di virtual screening, di un inibitore allosterico selettivo per EPAC1. La selezione della libreria di composti valutata tramite saggio biologico è ascrivibile al candidato. L'attività del lead compound è stata valutata in vitro ed in vivo. Il lavoro è congruente con il settore scientifico concorsuale 03/D1.*
3. Masci D, Hind C, Islam MK, Toscani A, Clifford M, Coluccia A, Conforti I, Touitou M, Memdouh S, Wei X, La Regina G, Silvestri R, Sutton JM, Castagnolo D. Switching on the activity of 1,5-diaryl-pyrrole derivatives against drug-resistant ESKAPE bacteria: Structure-activity relationships and mode of action studies. European Journal Medicinal Chemistry, 2019, 500-514. IF 2018 = 4.833; Citations: 0. ISSN 0009-4374, Elsevier, Amsterdam, NL. **Valutazione: Ottimo.** *Il lavoro riporta l'identificazione e la valutazione biologica di una serie di derivati attivi su ESKAPE bacteria. Il docking molecolare svolto dal candidato è stato utilizzato per identificare un possibile sito d'azione in accordo con i dati biologici. Lo studio della SAR e del binding mode sono coerenti con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1 e le tematiche del settore scientifico disciplinare.*
4. Da Costa, L, Scheers, E, Coluccia, A, Casulli, A, Roche, M, Di Giorgio, C, Neyts, J, Terme, T, Cirilli, R, La Regina, G, Mirabelli, C, Silvestri, R, Vanelle, P. Structure-Based Drug Design of Potent Pyrazole Derivatives against Rhinovirus Replication. Journal of Medicinal Chemistry. 2018, 61, 8402-8416. IF 2017 = 6.253, IF 2018 = 6.054; Citations: 3. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington. **Valutazione: Eccellente.** *Questo manoscritto descrive il design, la predizione in-silico e la valutazione biologica di una serie di leganti del capsido come potenziali agenti contro i rhinovirus (HRV). La tematica della ricerca e le metodologie sono congruenti con il settore concorsuale 03/D1 e il scientifico disciplinare CHIM/08. Il ruolo svolto dal candidato è identificabile nella progettazione e svolgimento della sezione di molecular modeling.*
5. Saponaro, C, Sergio, S, Coluccia, A, De Luca, M, La Regina, G, Mologni, L, Naccarato, V, Bonetti D, Gautier C, Gianni S, Vergara D, Salzet M, Fournier I, Bucci C, Silvestri R, Gambacorti Passerini C, Maffia M, Coluccia AML.  $\beta$ -catenin knockdown promotes NHERF1-mediated survival of colorectal cancer cells: implications for a double-targeted therapy

- Oncogene. 2018, 37, 3301-3316. DOI: 10.1038/s41388-018-0170-y. IF 2017 = 6.854, IF 2018 = 6.634; Citations: 5 ISSN 1476-5594, Springer Nature, Berlin, Germany.
- Valutazione: Ottimo.** *Il candidato ha condotto studi di virtual screening per l'identificazione di un inibitore NHERF1 potenzialmente utile per la terapia del cancro del colon-retto. La ricerca è stata condotta con rigore metodologico ed è congruente con le declaratorie del settore concorsuale.*
6. La Regina G, Bai R, Coluccia A, Naccarato V, Famiglini V, Nalli M, Masci D, Verrico A, Rovella P, Mazzoccoli C, Da Pozzo E, Cavallini C, Martini C, Voltuggio S, Dondio G, Varasi, M Mercurio, C Hamel, H Lavia, P Silvestri, R. New 6- and 7-heterocyclyl-1H-indole derivatives as potent tubulin assembly and cancer cell growth inhibitors. European Journal of Medicinal Chemistry. 2018, 152, 283-297. IF 2017 = 4.816, IF 2018 = 4.833; Citations: 3. ISSN 0009-4374, Elsevier, Amsterdam, NL.
- Valutazione: Eccellente.** *Il lavoro descrive la progettazione, la sintesi, lo studio del binding mode e la valutazione biologica di una serie di inibitori della polimerizzazione della tubulina. Il candidato ha svolto gli studi di docking e le predizioni ADME. Il campo di applicazione e le metodologie seguite sono in accordo con le declaratorie del Settore concorsuale 03/D1.*
7. Famiglini V, La Regina G, Coluccia A, Masci D, Brancale A, Badia R, Riveira-Munoz E, Estè JA, Crespan E, Brambilla A, Maga G, Catalano M, Limatola C, Formica FR, Cirilli R, Novellino E, Silvestri R. Chiral Indolylarylsulfone Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors as New Potent and Broad Spectrum Anti-HIV-1 Agents. Journal of Medicinal Chemistry. 2017, 60, 6528-6547. IF 2016 = 6.259, IF 2017 = 6.253; Citations: 5. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.
- Valutazione: Eccellente.** *Il manoscritto riporta la progettazione, la sintesi e la valutazione biologica di una classe di inibitori allosterici della Trascrittasi Inversa di HIV-1. Gli studi di modeling svolti con corretto rigore metodologico sono ascrivibili al candidato. La ricerca rientra negli ambiti propri del settore concorsuale 03/D1 e del settore scientifico disciplinare chimico farmaceutico.*
8. Di Cesare E, Verrico A, Miele A, Giubettini M, Rovella P, Coluccia A, Famiglini V, La Regina G, Cundari E, Silvestri R, Lavia P. Mitotic cell death induction by targeting the mitotic spindle with tubulin-inhibitory indole derivative molecules. Oncotarget 2017, 8, 19738-19759. IF 2016 = 5.186, IF 2017 = nd; Citations: 17. ISSN: 1949-2553, Impact Journals, New York, USA.
- Valutazione: Ottimo.** *Il lavoro ha come oggetto lo studio dei pathway cellulari attivati/disattivati in seguito alla somministrazione di inibitori della polimerizzazione della tubulina. La tematica è pertinente con il settore concorsuale 03/D1.*
9. Da Costa L, Scheers E, Coluccia A, Rosetti A, Roche M, Neyts J, Terme T, Cirilli R, Mirabelli C, Silvestri R, Vanelle P. Heterocyclic pharmacology of new rhinovirus antiviral agents: A combined computational and experimental study. European Journal of Medicinal Chemistry. 2017,140, 528-541. IF 2016 = 4.519, IF 2017 = 4.816; Citations: 6. ISSN 0009-4374, Elsevier, Amsterdam, NL.
- Valutazione: Eccellente.** *Il lavoro in oggetto riporta la progettazione, sintesi e valutazione biologica di derivati 4,5-dimetossibenzilici, con attività anti Rhinovirus (HRV). Il meccanismo d'azione, chiarito mediante esperimenti di time of drug addiction, si basa sull'inibizione dell'uncoating di VP1 al capsid. Studi di docking hanno permesso di razionalizzare la SAR e giustificare la migliore attività degli eutomeri rispetto ai distomeri. Il campo di applicazione e le metodologie seguite sono congruenti con le declaratorie del settore concorsuale.*
10. Coluccia A, Passacantilli S, Famiglini V, Sabatino M, Patsilnakos 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. Journal of Medicinal Chemistry. 2016, 59, 9760-9773. Scientific Article; IF 2015 = 5.589, IF 2016 = 6.259; Citations: 13. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.
- Valutazione: Eccellente.** *Il lead compound è stato identificato mediante un approccio di structure based virtual screening. Gli studi SAR hanno permesso di migliorare l'attività*

*biologica. La ricerca e la metodica seguita sono coerenti con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*

11. Massarotti A, Coluccia A.\* An in-silico approach aimed to clarify the role of Y181C and K103N HIV-1 reverse transcriptase mutations versus Indole Aryl Sulphones Journal: Journal of Molecular Graphics and Modelling. 2016, 63, 49-56. Scientific Article; IF 2015 = 1.674, IF 2016 = 1.754; Citations: 2. ISSN: 1093-3263; Elsevier, Amsterdam, NL.

**Valutazione. Ottimo.** *Il lavoro riporta dinamica molecolare, principal components analysis (PCA) e residue interactions networks (RINs) al fine di chiarire come due mutazioni molto comuni della Trascrittasi Inversa (Y181C e K103N) di HIV-1 influiscano sul legame degli inibitori non nucleosidici. Il campo di applicazione e le metodologie seguite sono congruenti con le declaratorie del settore concorsuale.*

12. La Regina G, Coluccia A, Famigliani V, Pelliccia S, Monti L, Vullo D, Nuti E, Alterio V, De Simone G, Monti, SM, Pan P, Parkkila S, Supuran CT, Rossello A, Silvestri R. Discovery of 1,1'-Biphenyl-4-sulfonamides as a New Class of Potent and Selective Carbonic Anhydrase XIV Inhibitors. Journal: Journal of Medicinal Chemistry. 2015, 58, 8564-8572. IF 2014 = 5.447, IF 2015 = 5.589; Citations: 19. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington.

**Valutazione: Ottimo.** *Il lavoro descrive la progettazione, sintesi e valutazione biologica di una serie di inibitori dell'isoforma XII dell'Anidrasi Carbonica. Il candidato ha condotto l'analisi delle pose di legame che ha permesso di chiarire la spiccata selettività delle molecole studiate verso l'isoforma XIV dell'enzima. La ricerca è congruente con il settore concorsuale 03/D1 e rientra negli ambiti propri del settore scientifico disciplinare.*

13. La Regina G, Bai R, Coluccia A, Famigliani V, Pelliccia S, Passacantilli S, Mazzoccoli C, Ruggieri, V, Verrico, A, Miele, A, Monti, L, Nalli, M, Alfonsi, R, Di Marcotullio, L, Gulino, A, Ricci B, Soriani A, Santoni A, Caraglia M, Porto S, Da Pozzo E, Martini C, Brancale A, Marinelli L, Novellino E, Vultaggio S, Varasi M, Mercurio C, Bigogno C, Dondio G, Hamel E, Lavia P, Silvestri R. New Indole Tubulin Assembly Inhibitors Cause Stable Arrest of Mitotic Progression, Enhanced Stimulation of Natural Killer Cell Cytotoxic Activity, and Repression of Hedgehog-Dependent Cancer. Journal of Medicinal Chemistry. 2015, 58, 5789-5807. IF 2014 = 5.447, IF 2015 = 5.589; Citations: 27. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington.

**Valutazione: Eccellente.** *Il lavoro è incentrato sulla sintesi e valutazione biologica di una nuova generazione di ArilTioIndoli. Gli studi di docking condotti dal candidato hanno permesso di individuare un binding mode consistente, razionalizzare la SAR ed identificare i requisiti strutturali necessari per un favorevole legame alla tubulina. L'attività di ricerca è coerente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*

14. Stornaiuolo M, La Regina G, Passacantilli S, Grassia G, Coluccia A, La Pietra V, Giustiniano M, Cassese H, Di Maro S, Brancaccio D, Taliani S, Ialenti A, Silvestri R, Martini C, Novellino E, Marinelli L. Structure-Based Lead Optimization and Biological Evaluation of BAX Direct Activators as Novel Potential Anticancer Agents. Journal of Medicinal Chemistry. 2015, 58, 2135-2148. IF 2014 = 5.447, IF 2015 = 5.589; Citations: 14. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Ottimo.** *Il manoscritto riporta la progettazione di una piccola serie di inibitori dell'enzima BAX con potenziale attività antitumorale. Il contributo del candidato è negli studi di docking e nel rebranching. Il lavoro è coerente con il settore scientifico concorsuale.*

15. Famigliani V, La Regina G, Coluccia A, Pelliccia S, Brancale A, Maga G, Crespan E, Badia R, Riveira-Munoz E, Estè JA, Ferretti R, Cirilli R, Zamperini C, Botta M, Schols D, Limongelli V, Agostino B, Novellino E, Silvestri R. Indolylarylsulfones Carrying a Heterocyclic Tail as Very Potent and Broad Spectrum HIV-1 Nonnucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors. Journal of Medicinal Chemistry. 2014, 5, 9945-9957. IF 2013 = 5,480, IF 2014 = 5.589; Citations: 27. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Eccellente.** *Studi di docking di una nuova generazione di inibitori non-nucleosidici della trascrittasi inversa di HIV-1, hanno permesso di identificare un binding*

*mode consistente, mentre l'analisi della dinamica molecolare ha chiarito le interazioni degli eutomeri all'interno della tasca allosterica alla RT sia WT che mutata. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*

16. La Regina G, Bai R, Coluccia A, Famiglini V, Pelliccia S, Passacantilli S, Mazzoccoli C, Ruggieri V, Sisinni L, Bolognesi A, Rensen WM, Miele A, Nalli M, Alfonsi R, Di Marcotullio L, Gulino A, Brancale A, Novellino E, Dondio G, Vultaggio S, Varasi M, Mercurio C, Hamel E, Lavia P, Silvestri R. New pyrrole derivatives with potent tubulin polymerization inhibiting activity as anticancer agents including hedgehog-dependent cancer. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2014, 4, 6531-6552. IF 2013 = 5,480, IF 2014 = 5.589; Citations: 41. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Eccellente.** *Il lavoro riporta la progettazione, valutazione in-silico e sintesi di una nuova classe di inibitori della polimerizzazione della tubulina identificati come 3-Aroil-1,4-diaroilpirroli (ARDAP). Gli studi di docking hanno mostrato come i derivati progettati avessero un binding mode sovrapponibile con i composti di riferimento quali Colchicina e ArilTioIndoli (ATI). Il ruolo del candidato è enucleabile nella sezione di molecular modelling. Il lavoro è coerente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*

17. Marzaro G, Coluccia A, Ferrarese A, Brun P, Castagliuolo I, Conconi MT, La Regina G, Bai R, Silvestri R, Hamel E, Chilin A. Title: Discovery of biarylaminquinazolines as novel tubulin polymerization inhibitors. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2014, 12, 4598-4605. IF 2013 = 5,480, IF 2014 = 5.589; Citations: 16. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Eccellente.** *Il manoscritto riporta l'identificazione di potenziali agenti antitumorali. E' stato applicato un filtro farmacoforico ad una serie di composti ad attività inibitoria nota su un pannello di chinasi. La parte svolta dal candidato è enucleabile. La tematica del lavoro è coerente con il settore concorsuale 03/D1 e le tematiche del settore scientifico disciplinare.*

18. Famiglini V, La Regina G, Coluccia A, Pelliccia S, Brancale A, Maga G, Crespan E, Badia R, Clotet B, Estè, JA, Cirilli R, Novellino E, Silvestri R. New indolylarylsulfones as highly potent and broad spectrum HIV-1 non-nucleoside reverse transcriptase inhibitors. *Journal: European Journal Medicinal Chemistry*. 2014 10; 101-111. IF 2013 = 3.432, IF 2014 = 5.589; Citations: 15. ISSN 0009-4374, Elsevier, Amsterdam, NL.

**Valutazione: Ottimo.** *Questo lavoro riporta una serie di inibitori della Trascrittasi Inversa (RT) di HIV-1 che hanno mostrato inibizione della RT WT a concentrazioni nanomolari. Gli studi di docking e dinamica molecolare svolti dal candidato hanno permesso di identificare un binding mode consistente e razionalizzare la SAR. La ricerca svolta è coerente con le declaratorie del settore concorsuale.*

19. La Pietra V, La Regina G, Coluccia A, Famiglini V, Pelliccia S, Plotkin B, Eldar- Finkelman H, Brancale A, Ballatore C, Crowe A, Brunden KR, Marinelli L, Novellino E, Silvestri R. Design, synthesis, and biological evaluation of 1-phenylpyrazolo[3,4-e]pyrrolo[3,4-g]indolizine- 4,6(1H,5H)-diones as new glycogen synthase kinase-3 $\beta$  inhibitors. *Journal: Journal Medicinal Chemistry*. 2013, 27, 10066-10078. IF 2012 = 5,614, IF 2013 = 5.580; Citations: 19. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Ottimo.** *Il manoscritto riporta la progettazione, sintesi e valutazione biologica di una classe di inibitori della chinasi GSK3 ad attività antitumorale. L'ottimizzazione del lead compound è stata svolta mediante calcoli di free energy perturbation. Il candidato ha svolto gli studi di docking. Il manoscritto è coerente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*

20. Mead RJ, Higginbottom A, Allen SP, Kirby J, Bennett E, Barber SC, Heath PR, Coluccia A, Patel N, Gardner I, Brancale A, Grierson AJ, Shaw PJ. S[+] Apomorphine is a CNS penetrating activator of the Nrf2-ARE pathway with activity in mouse and patient fibroblast models of amyotrophic lateral sclerosis. *Free Radical Biology & Medicine*. 2013, 19 438-452. IF 2012 = 5.271, IF 2013 = 5.710; Citations: 34.

**Valutazione: Ottimo.** *Il lavoro riporta lo studio di attivatori del pathway Nrf2-ARE come potenziali agenti utili nelle malattie neurodegenerative ed in particolare modo in un modello in*

*vitro di Sclerosi Laterale Amiotrofica. La parte svolta dal candidato sono gli studi di molecular modeling. Il lavoro è coerente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*

#### VALUTAZIONE SULLE PUBBLICAZIONI SELEZIONATE

Le 20 pubblicazioni che il dott. ANTONIO COLUCCIA ha selezionato per la valutazione analitica della presente procedura sono incentrate su ricerche chimico farmaceutiche svolte per la maggior parte nel campo degli agenti antivirali ed antitumorali. Le pubblicazioni selezionate hanno ottenuto un ottimo numero di citazioni, con una media per prodotto di 13,3, e sono tutte pienamente attinenti al settore scientifico disciplinare chimico farmaceutico oggetto della presente procedura. Il candidato dimostra un'ottima maturità scientifica. Sulla base delle competenze dichiarate nel CV, il suo ruolo nei lavori risulta sempre enucleabile. In due delle 20 selezionate risulta primo autore e in una autore corrispondente. Complessivamente, le 20 pubblicazioni presentate dal candidato sono di livello eccellente.

#### VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

Dalla produzione scientifica del dott. ANTONIO COLUCCIA si evince che egli ha svolto in modo continuativo la sua attività di ricerca nell'ambito della progettazione e sviluppo di nuove molecole di interesse terapeutico attive principalmente nel campo dei farmaci antitumorali e antivirali. Il ruolo individuale del candidato è dimostrato da numerose pubblicazioni scientifiche internazionali; in alcune di esse egli è primo autore. L'analisi degli indici scientometrici evidenzia che la ricerca svolta dal candidato è di livello eccellente durante tutto l'arco temporale della produzione scientifica.

#### COMMISSARIO 2 - Prof.ssa LUCIANA MARINELLI

#### TITOLI

##### Valutazione sui titoli

Il candidato dott. ANTONIO COLUCCIA è, ad oggi, ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il settore concorsuale 03/D1 - settore scientifico-disciplinare CHIM/08 - presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". La sua formazione è avvenuta inizialmente presso l'Università "La Sapienza" dove ha conseguito il dottorato di ricerca nel 2008. Successivamente ha perfezionato la propria formazione con un biennio presso la Welsh School of Pharmacy (Cardiff, Gran Bretagna). Ha successivamente usufruito di borse di studio erogate dall'Istituto Pasteur – Fondazione Cenci Bolognetti e dall'Università "La Sapienza". Nel 2017 ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale per il Settore concorsuale 03/D1, Chimica e tecnologie farmaceutiche, tossicologiche e nutraceutico-alimentari. Dal 2012 il candidato svolge attività didattica in modo continuativo e intenso su corsi d'insegnamento del settore della chimica farmaceutica, pienamente attinenti con l'SSD oggetto del concorso. Il candidato ha partecipato a diversi progetti di ricerca finanziati, in un caso come Responsabile di progetto. Egli ha partecipato a convegni nel campo della chimica farmaceutica sia come relatore che come organizzatore. Egli è co-inventore di un brevetto europeo. I titoli del candidato, nel loro complesso, sono ritenuti ottimi, mostrando intensità, continuità e piena congruenza con le declaratorie del Settore Concorsuale 03/D1 e con le tematiche del Settore Scientifico Disciplinare CHIM/08.

#### PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. Coluccia A, La Regina G, Naccarato V, Nalli M, Orlando O, Biagioni S, De Angelis ML, Baiocchi M, Gautier C, Gianni S, Di Pastena F, Di Magno L, Canettieri G, Coluccia AML, Silvestri R. Drug Design and Synthesis of First in Class PDZ1 Targeting NHERF1 Inhibitors as Anticancer Agents. ACS Journal Medicinal Chemistry Letters, 2019, 10, 499-503. IF 2018 = 3.794; Citations: 0. ISSN: 1948-5875, American Chemical Society, Washington, USA.  
**Valutazione: Ottimo.** Il manoscritto riporta uno studio virtual screening per identificare modulatori competitivi del dominio PDZ1 di NHERF1. Il lavoro è stato svolto con originalità e rigore metodologico. La tematica è congruente le declaratorie del settore concorsuale 03/D1. Il contributo del candidato è chiaramente enucleabile.

2. Laudette M, Coluccia A, Sainte-Marie Y, Solari A, Fazal L, Sicard P, Silvestri R, Mialet-Perez J, Pons S, Ghaleh B, Blondeau, JP, Lezoualch F. Identification of a pharmacological inhibitor of Epac1 that protects the heart against acute and chronic models of cardiac stress. *Cardiovascular Research*. 2019, 115, 1766-1777. IF 2018 = 6.290; Citations: 0. ISSN: 1755-3245, Oxford University Press, Oxford, UK,  
**Valutazione: Ottimo.** *Un inibitore allosterico selettivo di EPAC1 è stato individuato attraverso il virtual screening di una libreria selezionata dal candidato. Il lavoro è pienamente congruente con il settore scientifico disciplinare CHIM/08. Il contributo del candidato è chiaramente enucleabile sulla base delle competenze dichiarate nel CV.*
3. Masci D, Hind C, Islam MK, Toscani A, Clifford M, Coluccia A, Conforti I, Touitou M, Memdouh S, Wei X, La Regina G, Silvestri R, Sutton JM, Castagnolo D. Switching on the activity of 1,5-diaryl-pyrrole derivatives against drug-resistant ESKAPE bacteria: Structure-activity relationships and mode of action studies. *European Journal Medicinal Chemistry*, 2019, 500-514. IF 2018 = 4.833; Citations: 0. ISSN 0009-4374, Elsevier, Amsterdam, NL.  
**Valutazione: Ottimo.** *Il candidato ha eseguito il docking molecolare per identificare il possibile meccanismo d'azione. Le tematiche sono coerenti con il settore scientifico disciplinare. Il contributo del candidato è chiaramente enucleabile sulla base delle competenze dichiarate nel CV.*
4. Da Costa, L, Scheers, E, Coluccia, A, Casulli, A, Roche, M, Di Giorgio, C, Neyts, J, Terme, T, Cirilli, R, La Regina, G, Mirabelli, C, Silvestri, R, Vanelle, P. Structure-Based Drug Design of Potent Pyrazole Derivatives against Rhinovirus Replication. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2018, 61, 8402-8416. IF 2017 = 6.253, IF 2018 = 6.054; Citations: 3. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington.  
**Valutazione: Eccellente.** *Il manoscritto riporta gli studi computazionali svolti dal candidato volti a predire lo spettro d'azione di composti nei confronti di vari isotipi di HRV. Le tematiche trattate sono congruenti con quelle del settore concorsuale.*
5. Saponaro, C, Sergio, S, Coluccia, A, De Luca, M, La Regina, G, Mologni, L, Naccarato, V, Bonetti D, Gautier C, Gianni S, Vergara D, Salzet M, Fournier I, Bucci C, Silvestri R, Gambacorti Passerini C, Maffia M, Coluccia AML.  $\beta$ -catenin knockdown promotes NHERF1-mediated survival of colorectal cancer cells: implications for a double-targeted therapy *Oncogene*. 2018, 37, 3301-3316. DOI: 10.1038/s41388-018-0170-y. IF 2017 = 6.854, IF 2018 = 6.634; Citations: 5 ISSN 1476-5594, Springer Nature, Berlin, Germany.  
**Valutazione: Ottimo.** *Il manoscritto ha identificato la relazione patologica tra NHERF1 e  $\beta$ -catenina nello sviluppo e progressione del cancro del colon-retto. L'inibitore di NHERF1 è stato identificato tramite virtual screening eseguito dal candidato. La ricerca è coerente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
6. La Regina G, Bai R, Coluccia A, Naccarato V, Famiglini V, Nalli M, Masci D, Verrico A, Rovella P, Mazzoccoli C, Da Pozzo E, Cavallini C, Martini C, Voltuggio S, Dondio G, Varasi, M Mercurio, C Hamel, H Lavia, P Silvestri, R. New 6- and 7-heterocyclyl-1H-indole derivatives as potent tubulin assembly and cancer cell growth inhibitors. *European Journal of Medicinal Chemistry*. 2018, 152, 283-297. IF 2017 = 4.816, IF 2018 = 4.833; Citations: 3. ISSN 0009-4374, Elsevier, Amsterdam, NL.  
**Valutazione: Ottimo.** *Il candidato ha svolto gli studi di docking e le predizioni ADME di una serie di inibitori della polimerizzazione della tubulina. Le metodologie seguite sono in accordo con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
7. Famiglini V, La Regina G, Coluccia A, Masci D, Brancale A, Badia R, Riveira-Munoz E, Esté JA, Crespan E, Brambilla A, Maga G, Catalano M, Limatola C, Formica FR, Cirilli R, Novellino E, Silvestri R. Chiral Indolylarylsulfone Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors as New Potent and Broad Spectrum Anti-HIV-1 Agents. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2017, 60, 6528-6547. IF 2016 = 6.259, IF 2017 = 6.253; Citations: 5. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Eccellente.** Il candidato ha svolto studi computazionali volti alla progettazione di una classe di NNRTI di HIV-1. La ricerca è stata svolta con rigore metodologico. La tematica è congruente con il settore chimico farmaceutico.

8. Di Cesare E, Verrico A, Miele A, Giubettini M, Rovella P, Coluccia A, Famigliani V, La Regina G, Cundari E, Silvestri R, Lavia P. Mitotic cell death induction by targeting the mitotic spindle with tubulin-inhibitory indole derivative molecules. *Oncotarget* 2017, 8, 19738-19759. IF 2016 = 5.186, IF 2017 = nd; Citations: 17. ISSN: 1949-2553, Impact Journals, New York, USA.

**Valutazione: Ottimo.** Il lavoro riguarda lo sviluppo di nuovi inibitori della tubulina. Il lavoro è stato svolto con rigore metodologico. La tematica è pertinente con il settore scientifico disciplinare chimica farmaceutica. Il contributo del candidato è chiaramente enucleabile sulla base delle competenze dichiarate nel CV.

9. Da Costa L, Scheers E, Coluccia A, Rosetti A, Roche M, Neyts J, Terme T, Cirilli R, Mirabelli C, Silvestri R, Vanelle P. Heterocyclic pharmacology of new rhinovirus antiviral agents: A combined computational and experimental study. *European Journal of Medicinal Chemistry*. 2017,140, 528-541. IF 2016 = 4.519, IF 2017 = 4.816; Citations: 6. ISSN 0009-4374, Elsevier, Amsterdam, NL.

**Valutazione: Eccellente.** Il candidato ha svolto gli esperimenti di time of drug addiction e gli studi SAR per giustificare la migliore attività degli eutomeri rispetto ai distomeri. La tematica della ricerca e le metodologie seguite sono congruenti le tematiche del settore chimico farmaceutico.

10. Coluccia A, Passacantilli S, Famigliani V, Sabatino M, Patsilinakos 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. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2016, 59, 9760-9773. Scientific Article; IF 2015 = 5.589, IF 2016 = 6.259; Citations: 13. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Eccellente.** Il manoscritto riporta l'identificazione di inibitori dell'enzima Indoleamine-2,3 diossigenasi come potenziali antitumorali. Gli studi computazionali sono stati condotti dal candidato con rigore metodologico. La tematica è congruente con le declaratorie del settore concorsuale.

11. Massarotti A, Coluccia A. An in-silico approach aimed to clarify the role of Y181C and K103N HIV-1 reverse transcriptase mutations versus Indole Aryl Sulphones *Journal of Molecular Graphics and Modelling*. 2016, 63, 49-56. Scientific Article; IF 2015 = 1.674, IF 2016 = 1.754; Citations: 2. ISSN: 1093-3263; Elsevier, Amsterdam, NL.

**Valutazione: Buono.** Il candidato ha condotto gli studi di dinamica molecolare, PCA e RINs come studio dell'influenza delle mutazioni Y181C e K103N della RT di HIV-1 sul legame degli inibitori non nucleosidici. La tematica e le metodologie seguite sono congruenti con le declaratorie del settore concorsuale.

12. La Regina G, Coluccia A, Famigliani V, Pelliccia S, Monti L, Vullo D, Nuti E, Alterio V, De Simone G, Monti, SM, Pan P, Parkkila S, Supuran CT, Rossello A, Silvestri R. Discovery of 1,1'-Biphenyl-4-sulfonamides as a New Class of Potent and Selective Carbonic Anhydrase XIV Inhibitors. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2015, 58, 8564-8572. IF 2014 = 5.447, IF 2015 = 5.589; Citations: 19. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington.

**Valutazione: Eccellente.** Il candidato ha condotto l'analisi delle pose di legame ha permesso di chiarire la selettività dei ligandi studiati verso l'isoforma XIV della CA. La tematica della ricerca è congruente le finalità del settore scientifico disciplinare.

13. La Regina G, Bai R, Coluccia A, Famigliani V, Pelliccia S, Passacantilli S, Mazzoccoli C, Ruggieri, V, Verrico, A, Miele, A, Monti, L, Nalli, M, Alfonsi, R, Di Marcotullio, L, Gulino, A, Ricci B, Soriani A, Santoni A, Caraglia M, Porto S, Da Pozzo E, Martini C, Brancale A, Marinelli L, Novellino E, Vultaggio S, Varasi M, Mercurio C, Bigogno C, Dondio G, Hamel E, Lavia P, Silvestri R. New Indole Tubulin Assembly Inhibitors Cause Stable Arrest of Mitotic Progression, Enhanced Stimulation of Natural Killer Cell Cytotoxic Activity, and Repression



- of Hedgehog-Dependent Cancer. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2015, 58, 5789-5807. IF 2014 = 5.447, IF 2015 = 5.589; Citations: 27. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington.
- Valutazione: Eccellente.** *Gli studi di docking condotti dal candidato sono stati volti ad elucidare il binding mode e a definire i requisiti strutturali per il legame alla tubulina. La tematica della ricerca è coerente il settore scientifico disciplinare chimica farmaceutica.*
14. Stornaiuolo M, La Regina G, Passacantilli S, Grassia G, Coluccia A, La Pietra V, Giustiniano M, Cassese H, Di Maro S, Brancaccio D, Taliani S, Ialenti A, Silvestri R, Martini C, Novellino E, Marinelli L. Structure-Based Lead Optimization and Biological Evaluation of BAX Direct Activators as Novel Potential Anticancer Agents. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2015, 58, 2135-2148. IF 2014 = 5.447, IF 2015 = 5.589; Citations: 14. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.
- Valutazione: Eccellente.** *Il lavoro riguarda la progettazione, la sintesi e la valutazione biologica di nuovi attivatori della proteina proapoptotica "BAX". Il lavoro è congruente con le tematiche del settore scientifico disciplinare. Il contributo del candidato è chiaramente enucleabile sulla base delle competenze dichiarate nel CV.*
15. Famigliini V, La Regina G, Coluccia A, Pelliccia S, Brancale A, Maga G, Crespan E, Badia R, Riveira-Munoz E, Estè JA, Ferretti R, Cirilli R, Zamperini C, Botta M, Schols D, Limongelli V, Agostino B, Novellino E, Silvestri R. Indolylarylsulfones Carrying a Heterocyclic Tail as Very Potent and Broad Spectrum HIV-1 Nonnucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2014, 5, 9945-9957. IF 2013 = 5,480, IF 2014 = 5.589; Citations: 27. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.
- Valutazione: Eccellente.** *Il lavoro riporta la scoperta di nuovi inibitori della trascrittasi inversa dell'HIV. Esso è congruente con le tematiche del SSD chimico farmaceutico. Il contributo del candidato è chiaramente enucleabile sulla base delle competenze dichiarate nel CV.*
16. La Regina G, Bai R, Coluccia A, Famigliini V, Pelliccia S, Passacantilli S, Mazzoccoli C, Ruggieri V, Sisinni L, Bolognesi A, Rensen WM, Miele A, Nalli M, Alfonsi R, Di Marcotullio L, Gulino A, Brancale A, Novellino E, Dondio G, Vultaggio S, Varasi M, Mercurio C, Hamel E, Lavia P, Silvestri R. New pyrrole derivatives with potent tubulin polymerization inhibiting activity as anticancer agents including hedgehog-dependent cancer. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2014, 4, 6531-6552. IF 2013 = 5,480, IF 2014 = 5.589; Citations: 41. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.
- Valutazione: Eccellente.** *Il candidato ha condotto con rigore metodologico gli studi di docking di una nuova classe di antitumorali 3-Aroil-1,4-diaroipirroli (ARDAP). Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
17. Marzaro G, Coluccia A, Ferrarese A, Brun P, Castagliuolo I, Conconi MT, La Regina G, Bai R, Silvestri R, Hamel E, Chilin A. Title: Discovery of biarylaminquinazolines as novel tubulin polymerization inhibitors. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2014, 12, 4598-4605. IF 2013 = 5,480, IF 2014 = 5.589; Citations: 16. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.
- Valutazione: Eccellente.** *Il ruolo svolto dal candidato è enucleabile in base alle sue competenze, infatti un filtro farmacoforico è stato applicato ad una serie di inibitori di chinasi. La tematica del lavoro è congruente con il settore scientifico disciplinare.*
18. Famigliini V, La Regina G, Coluccia A, Pelliccia S, Brancale A, Maga G, Crespan E, Badia R, Clotet B, Estè, JA, Cirilli R, Novellino E, Silvestri R. New indolylarylsulfones as highly potent and broad spectrum HIV-1 non-nucleoside reverse transcriptase inhibitors. *Journal: European Journal Medicinal Chemistry*. 2014 10; 101-111. IF 2013 = 3.432, IF 2014 = 5.589; Citations: 15. ISSN 0009-4374, Elsevier, Amsterdam, NL.
- Valutazione: Eccellente.** *Il candidato ha svolto studi di docking e dinamica molecolare su una serie di inibitori della RT di HIV-1 attivi a concentrazioni nanomolari. La ricerca svolta è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
19. La Pietra V, La Regina G, Coluccia A, Famigliini V, Pelliccia S, Plotkin B, Eldar- Finkelman H, Brancale A, Ballatore C, Crowe A, Brunden KR, Marinelli L, Novellino E, Silvestri R.

Design, synthesis, and biological evaluation of 1-phenylpyrazolo[3,4-e]pyrrolo[3,4-g]indolizine-4,6(1H,5H)-diones as new glycogen synthase kinase-3 $\beta$  inhibitors. Journal: Journal Medicinal Chemistry. 2013, 27, 10066-10078. IF 2012 = 5,614, IF 2013 = 5.580; Citations: 19. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Eccellente.** Il candidato ha svolto gli studi di ottimizzazione di una classe di inibitori della chinasi GSK3 ad attività antitumorale. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1. Il ruolo del candidato è enucleabile.

20. Mead RJ, Higginbottom A, Allen SP, Kirby J, Bennett E, Barber SC, Heath PR, Coluccia A, Patel N, Gardner I, Brancale A, Grierson AJ, Shaw PJ. S[+] Apomorphine is a CNS penetrating activator of the Nrf2-ARE pathway with activity in mouse and patient fibroblast models of amyotrophic lateral sclerosis. Free Radical Biology & Medicine. 2013, 19 438-452. IF 2012 = 5.271, IF 2013 = 5.710; Citations: 34.

**Valutazione: Ottimo.** Il candidato ha svolto studi di molecular modelling per l'identificazione di attivatori del pathway Nrf2-ARE come potenziali agenti utili nelle malattie neurodegenerative, in particolare la SLA. Il lavoro è coerente con le declaratorie del settore concorsuale.

#### VALUTAZIONE SULLE PUBBLICAZIONI SELEZIONATE

Il dott. ANTONIO COLUCCIA presenta 20 pubblicazioni per la valutazione analitica. Esse riportano ricerche chimico farmaceutiche svolte nel campo degli agenti antivirali ed antitumorali. I lavori presentati sono tutti ritenuti pienamente attinenti al settore scientifico disciplinare oggetto del presente bando e posseggono un ottimo numero di citazioni (citazioni medie per prodotto=13,3). Il candidato appare come primo autore in due delle 20 pubblicazioni presentate, e come autore di riferimento in una di esse, evidenziando di aver raggiunto una buona maturità scientifica. Ad ogni modo, il suo ruolo è sempre enucleabile, sulla base delle competenze dichiarate nel CV. Complessivamente, le 20 pubblicazioni presentate dal candidato sono di livello più che ottimo.

#### VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

L'attività di ricerca del dott. ANTONIO COLUCCIA si è incentrata sull'applicazione di tecniche computazionali per la scoperta e lo sviluppo di nuove molecole a potenziale attività antivirale e antitumorale. Essa è pienamente focalizzata sul settore concorsuale 03/D1, e in particolare sulle tematiche del settore scientifico disciplinare CHIM/08. La produzione complessiva consta di un elevato numero di pubblicazioni, considerando l'età accademica del candidato (n. 57 lavori), e l'impact factor totale è elevato. L'H-index del candidato è ottimo (H-index= 23). La produzione scientifica complessiva del candidato è di livello più che ottimo.

#### COMMISSARIO 3 - Prof.ssa PAOLA CONTI

#### TITOLI

##### Valutazione sui titoli

Il dott. ANTONIO COLUCCIA è ricercatore a tempo determinato di tipologia A (3+2) per il settore concorsuale 03/D1 - settore scientifico-disciplinare CHIM/08 - presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Nel 2017 ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale per il Settore concorsuale 03/D1, Chimica e tecnologie farmaceutiche, tossicologiche e nutraceutico-alimentari. Dopo il dottorato di ricerca in Scienze pasteuriane, ha perfezionato la formazione con un biennio presso la Welsh School of Pharmacy (Cardiff, UK), ed ha usufruito di borse di studio. Svolge attività didattica nel settore della chimica farmaceutica dal 2012. Dal 2015, è titolare del corso di Analisi Chimico Farmaceutica e Tossicologica I con Laboratorio (12 CFU). Tutta l'attività didattica svolta è pienamente congruente con il settore concorsuale 03/D1. Ha partecipato a diversi progetti di ricerca finanziati, in un caso come Responsabile di progetto, ed ha partecipato a convegni nel campo della chimica farmaceutica sia come relatore che come organizzatore. Egli è co-inventore di un brevetto europeo. I titoli del candidato sono di livello ottimo e sono perfettamente congruenti con le declaratorie del Settore Concorsuale 03/D1 (Chimica e tecnologie farmaceutiche, tossicologiche e nutraceutico-alimentari).

## PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. Coluccia A, La Regina G, Naccarato V, Nalli M, Orlando O, Biagioni S, De Angelis ML, Baiocchi M, Gautier C, Gianni S, Di Pastena F, Di Magno L, Canettieri G, Coluccia AML, Silvestri R. Drug Design and Synthesis of First in Class PDZ1 Targeting NHERF1 Inhibitors as Anticancer Agents. ACS Journal Medicinal Chemistry Letters, 2019, 10, 499-503. IF 2018 = 3.794; Citations: 0. ISSN: 1948-5875, American Chemical Society, Washington, USA.  
**Valutazione: Ottimo.** Il lavoro presenta originalità e rigore metodologico. La tematica, inerente uno studio virtual screening per l'identificazione di modulatori competitivi del dominio PDZ1 di NHERF1, è pienamente congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1. Il contributo del candidato, primo autore del lavoro, è facilmente enucleabile.
2. Laudette M, Coluccia A, Sainte-Marie Y, Solari A, Fazal L, Sicard P, Silvestri R, Mialet-Perez J, Pons S, Ghaleh B, Blondeau, JP, Lezoualc'h F. Identification of a pharmacological inhibitor of Epac1 that protects the heart against acute and chronic models of cardiac stress. Cardiovascular Research. 2019, 115, 1766-1777.. IF 2018 = 6.290; Citations: 0. ISSN: 1755-3245, Oxford University Press, Oxford, UK,  
**Valutazione: Ottimo.** Il lavoro descrive l'efficacia di un inibitore di EPAC1, identificato in seguito allo screening di una libreria di composti, nel trattamento di disturbi cardiaci. Lavoro a prevalente carattere biologico pubblicato su una rivista ad elevato fattore di impatto.
3. Masci D, Hind C, Islam MK, Toscani A, Clifford M, Coluccia A, Conforti I, Touitou M, Memdouh S, Wei X, La Regina G, Silvestri R, Sutton JM, Castagnolo D. Switching on the activity of 1,5-diaryl-pyrrole derivatives against drug-resistant ESKAPE bacteria: Structure-activity relationships and mode of action studies. European Journal Medicinal Chemistry, 2019, 500-514. IF 2018 = 4.833; Citations: 0. ISSN 0009-4374, Elsevier, Amsterdam, NL.  
**Valutazione: Ottimo.** Il ruolo del candidato è enucleabile dagli studi di-docking che hanno consentito di identificare il possibile meccanismo d'azione di composti ad attività antibatterica. Le tematiche trattate sono pienamente congruenti con il settore concorsuale 03/D1.
4. Da Costa, L, Scheers, E, Coluccia, A, Casulli, A, Roche, M, Di Giorgio, C, Neyts, J, Terme, T, Cirilli, R, La Regina, G, Mirabelli, C, Silvestri, R, Vanelle, P. Structure-Based Drug Design of Potent Pyrazole Derivatives against Rhinovirus Replication. Journal of Medicinal Chemistry. 2018, 61, 8402-8416. IF 2017 = 6.253, IF 2018 = 6.054; Citations: 3. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington.  
**Valutazione: Eccellente.** Gli studi computazionali per la predizione di composti attivi contro vari isotipi di HRV evidenziano chiaramente il contributo del candidato. L'argomento trattato è pienamente congruente con le tematiche del settore concorsuale 03/D1.
5. Saponaro, C, Sergio, S, Coluccia, A, De Luca, M, La Regina, G, Mogni, L, Naccarato, V, Bonetti D, Gautier C, Gianni S, Vergara D, Salzet M, Fournier I, Bucci C, Silvestri R, Gambacorti Passerini C, Maffia M, Coluccia AML.  $\beta$ -catenin knockdown promotes NHERF1-mediated survival of colorectal cancer cells: implications for a double-targeted therapy Oncogene. 2018, 37, 3301-3316. DOI: 10.1038/s41388-018-0170-y. IF 2017 = 6.854, IF 2018 = 6.634; Citations: 5 ISSN 1476-5594, Springer Nature, Berlin, Germany.  
**Valutazione: Ottimo.** Il lavoro ha una forte impostazione biologica. Gli studi di virtual screening per l'identificazione di un inibitore NHERF1 evidenziano chiaramente il contributo del candidato, che è congruente con le tematiche del settore concorsuale 03/D1.
6. La Regina G, Bai R, Coluccia A, Naccarato V, Famiglini V, Nalli M, Masci D, Verrico A, Rovella P, Mazzoccoli C, Da Pozzo E, Cavallini C, Martini C, Voltuggio S, Dondio G, Varasi, M Mercurio, C Hamel, H Lavia, P Silvestri, R. New 6- and 7-heterocyclyl-1H-indole derivatives as potent tubulin assembly and cancer cell growth inhibitors. European Journal of Medicinal Chemistry. 2018, 152, 283-297. IF 2017 = 4.816, IF 2018 = 4.833; Citations: 3. ISSN 0009-4374, Elsevier, Amsterdam, NL.

**Valutazione: Ottimo.** Il ruolo del candidato è enucleabile dagli studi di docking e le predizioni ADME. Le tematiche del lavoro sono pienamente congruenti con quelle del settore concorsuale 03/D1.

- Famiglini V, La Regina G, Coluccia A, Masci D, Brancale A, Badia R, Riveira-Munoz E, Estè JA, Crespan E, Brambilla A, Maga G, Catalano M, Limatola C, Formica FR, Cirilli R, Novellino E, Silvestri R. Chiral Indolylarylsulfone Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors as New Potent and Broad Spectrum Anti-HIV-1 Agents. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2017, 60, 6528-6547. IF 2016 = 6.259, IF 2017 = 6.253; Citations: 5. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Eccellente.** Il ruolo del candidato è enucleabile dagli studi computazionali utili per la progettazione di nuovi NNRTI di HIV-1. Il tema della ricerca è pienamente congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.

- Di Cesare E, Verrico A, Miele A, Giubettini M, Rovella P, Coluccia A, Famiglini V, La Regina G, Cundari E, Silvestri R, Lavia P. Mitotic cell death induction by targeting the mitotic spindle with tubulin-inhibitory indole derivative molecules. *Oncotarget* 2017, 8, 19738-19759. IF 2016 = 5.186, IF 2017 = nd; Citations: 17. ISSN: 1949-2553, Impact Journals, New York, USA.

**Valutazione: Ottimo.** Il contributo del candidato è facilmente enucleabile ed è coerente con le declaratorie del settore 03/D1, anche se gli aspetti computazionali non rivestono un ruolo centrale nel lavoro.

- Da Costa L, Scheers E, Coluccia A, Rosetti A, Roche M, Neyts J, Terme T, Cirilli R, Mirabelli C, Silvestri R, Vanelle P. Heterocyclic pharmacology of new rhinovirus antiviral agents: A combined computational and experimental study. *European Journal of Medicinal Chemistry*. 2017, 140, 528-541. IF 2016 = 4.519, IF 2017 = 4.816; Citations: 6. ISSN 0009-4374, Elsevier, Amsterdam, NL.

**Valutazione: Ottimo.** Il lavoro in oggetto riporta la progettazione, sintesi e valutazione biologica di derivati 4,5-dimetossibenzilici, con attività anti Rhinovirus. Il contributo del candidato è enucleabile dagli studi di docking per la razionalizzazione delle relazioni struttura-attività. La tematica della ricerca è pienamente congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.

- Coluccia A, Passacantilli S, Famiglini V, Sabatino M, Patsilinakos 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. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2016, 59, 9760-9773. Scientific Article; IF 2015 = 5.589, IF 2016 = 6.259; Citations: 13. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Eccellente.** Il candidato, che è primo autore del lavoro, ha condotto gli studi computazionali che hanno portato all'identificazione di inibitori dell'enzima Indoleamine-2,3-diossigenasi come potenziali antitumorali. La tematica della ricerca è pienamente congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.

- Massarotti A, Coluccia A. An in-silico approach aimed to clarify the role of Y181C and K103N HIV-1 reverse transcriptase mutations versus Indole Aryl Sulphones *Journal of Molecular Graphics and Modelling*. 2016, 63, 49-56. Scientific Article; IF 2015 = 1.674, IF 2016 = 1.754; Citations: 2. ISSN: 1093-3263; Elsevier, Amsterdam, NL.

**Valutazione: Buono.** Il contributo del candidato, che è anche autore di riferimento, è evidente e il lavoro è interamente incentrato su tematiche di molecular modelling. La tematica della ricerca è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.

- La Regina G, Coluccia A, Famiglini V, Pelliccia S, Monti L, Vullo D, Nuti E, Alterio V, De Simone G, Monti, SM, Pan P, Parkkila S, Supuran CT, Rossello A, Silvestri R. Discovery of 1,1'-Biphenyl-4-sulfonamides as a New Class of Potent and Selective Carbonic Anhydrase XIV Inhibitors. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2015, 58, 8564-8572. IF 2014 = 5.447, IF 2015 = 5.589; Citations: 19. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington.

**Valutazione: Eccellente.** Il ruolo del candidato è enucleabile dallo studio delle pose di legame verso l'isoforma XIV dell'enzima. La tematica della ricerca è pienamente congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.

13. La Regina G, Bai R, Coluccia A, Famigliani V, Pelliccia S, Passacantilli S, Mazzoccoli C, Ruggieri, V, Verrico, A, Miele, A, Monti, L, Nalli, M, Alfonsi, R, Di Marcotullio, L, Gulino, A, Ricci B, Soriani A, Santoni A, Caraglia M, Porto S, Da Pozzo E, Martini C, Brancale A, Marinelli L, Novellino E, Vultaggio S, Varasi M, Mercurio C, Bigogno C, Dondio G, Hamel E, Lavia P, Silvestri R. New Indole Tubulin Assembly Inhibitors Cause Stable Arrest of Mitotic Progression, Enhanced Stimulation of Natural Killer Cell Cytotoxic Activity, and Repression of Hedgehog-Dependent Cancer. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2015, 58, 5789-5807. IF 2014 = 5.447, IF 2015 = 5.589; Citations: 27. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington.

**Valutazione: Eccellente.** Il contributo del candidato è enucleabile dagli studi computazionali applicati allo studio delle SAR e all'elucidazione del modo di legame alla tubulina. La tematica della ricerca è pienamente congruente con il settore concorsuale 03/D1.

14. Stornaiuolo M, La Regina G, Passacantilli S, Grassia G, Coluccia A, La Pietra V, Giustiniano M, Cassese H, Di Maro S, Brancaccio D, Taliani S, Ialenti A, Silvestri R, Martini C, Novellino E, Marinelli L. Structure-Based Lead Optimization and Biological Evaluation of BAX Direct Activators as Novel Potential Anticancer Agents. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2015, 58, 2135-2148. IF 2014 = 5.447, IF 2015 = 5.589; Citations: 14. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Eccellente.** Il ruolo del candidato, è enucleabile dagli studi di docking e di rebranching., La tematica è pienamente congruente con il settore concorsuale 03/D1.

15. Famigliani V, La Regina G, Coluccia A, Pelliccia S, Brancale A, Maga G, Crespan E, Badia R, Riveira-Munoz E, Estè JA, Ferretti R, Cirilli R, Zamperini C, Botta M, Schols D, Limongelli V, Agostino B, Novellino E, Silvestri R. Indolylarylsulfones Carrying a Heterocyclic Tail as Very Potent and Broad Spectrum HIV-1 Nonnucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2014, 5, 9945-9957. IF 2013 = 5,480, IF 2014 = 5.589; Citations: 27. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Eccellente.** Il ruolo svolto dal candidato negli studi di docking e di dinamica molecolare nella tasca degli NNRTI di HIV-1 è enucleabile. La tematica della ricerca è congruente con il settore 03/D1.

16. La Regina G, Bai R, Coluccia A, Famigliani V, Pelliccia S, Passacantilli S, Mazzoccoli C, Ruggieri V, Sisinni L, Bolognesi A, Rensen WM, Miele A, Nalli M, Alfonsi R, Di Marcotullio L, Gulino A, Brancale A, Novellino E, Dondio G, Vultaggio S, Varasi M, Mercurio C, Hamel E, Lavia P, Silvestri R. New pyrrole derivatives with potent tubulin polymerization inhibiting activity as anticancer agents including hedgehog-dependent cancer. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2014, 4, 6531-6552. IF 2013 = 5,480, IF 2014 = 5.589; Citations: 41. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Eccellente.** Il ruolo del candidato è enucleabile dagli studi di docking molecolare. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.

17. Marzaro G, Coluccia A, Ferrarese A, Brun P, Castagliuolo I, Conconi MT, La Regina G, Bai R, Silvestri R, Hamel E, Chilin A. Title: Discovery of biarylaminquinazolines as novel tubulin polymerization inhibitors. *Journal of Medicinal Chemistry*. 2014, 12, 4598-4605. IF 2013 = 5,480, IF 2014 = 5.589; Citations: 16. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Eccellente.** Il ruolo dal candidato è enucleabile dagli studi che hanno portato all'identificazione di nuovi agenti antitumorali attraverso l'applicazione di un filtro farmacoforico ad una serie di inibitori di chinasi. La tematica è pienamente congruente con il settore concorsuale 03/D1.

18. Famigliani V, La Regina G, Coluccia A, Pelliccia S, Brancale A, Maga G, Crespan E, Badia R, Clotet B, Estè, JA, Cirilli R, Novellino E, Silvestri R. New indolylarylsulfones as highly potent and broad spectrum HIV-1 non-nucleoside reverse transcriptase inhibitors. *Journal*:

European Journal Medicinal Chemistry. 2014 10; 101-111. IF 2013 = 3.432, IF 2014 = 5.589; Citations: 15. ISSN 0009-4374, Elsevier, Amsterdam, NL.

**Valutazione: Ottimo.** *Il ruolo del candidato negli studi di docking e dinamica molecolare su inibitori della RT di HIV-1 è enucleabile. La ricerca è congruente con le tematiche del settore concorsuale 03/D1.*

19. La Pietra V, La Regina G, Coluccia A, Famiglini V, Pelliccia S, Plotkin B, Eldar- Finkelman H, Brancale A, Ballatore C, Crowe A, Brunden KR, Marinelli L, Novellino E, Silvestri R. Design, synthesis, and biological evaluation of 1-phenylpyrazolo[3,4-e]pyrrolo[3,4-g]indolizine- 4,6(1H,5H)-diones as new glycogen synthase kinase-3 $\beta$  inhibitors. Journal: Journal Medicinal Chemistry. 2013, 27, 10066-10078. IF 2012 = 5,614, IF 2013 = 5.580; Citations: 19. ISSN: 1520-4804, American Chemical Society, Washington, USA.

**Valutazione: Eccellente.** *Il ruolo del candidato nell'ottimizzazione di una classe di inibitori di GSK3 ad attività antitumorale è enucleabile. Il lavoro è pienamente congruente con le tematiche del settore concorsuale 03/D1.*

20. Mead RJ, Higginbottom A, Allen SP, Kirby J, Bennett E, Barber SC, Heath PR, Coluccia A, Patel N, Gardner I, Brancale A, Grierson AJ, Shaw PJ. S[+] Apomorphine is a CNS penetrating activator of the Nrf2-ARE pathway with activity in mouse and patient fibroblast models of amyotrophic lateral sclerosis. Free Radical Biology & Medicine. 2013, 19 438-452. IF 2012 = 5.271, IF 2013 = 5.710; Citations: 34.

**Valutazione: Ottimo.** *Il lavoro, che descrive lo studio di attivatori del pathway Nrf2-ARE come potenziali agenti per il trattamento di patologie neurodegenerative, è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1. Il contributo del candidato è facilmente enucleabile anche se gli aspetti computazionali non rivestono un ruolo centrale nel lavoro.*

#### VALUTAZIONE SULLE PUBBLICAZIONI SELEZIONATE

Il candidato ha presentato 20 pubblicazioni per la valutazione analitica. In due di esse risulta primo autore e in un caso è autore di riferimento. In tutti i casi il ruolo del candidato è facilmente enucleabile sulla base delle sue competenze scientifiche, che si possono evincere dal curriculum. La produzione scientifica del dott. ANTONIO COLUCCIA è quasi completamente incentrata sulla progettazione e sviluppo di nuovi agenti antitumorali ed antivirali. Tutte le ricerche descritte sono state svolte con apprezzabile rigore metodologico. Le pubblicazioni scientifiche appaiono perfettamente coerenti con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1 e del settore scientifico disciplinare CHIM/08. Le pubblicazioni presentate sono riportate su riviste internazionali ad elevato indice di impatto. Nel complesso le pubblicazioni presentate sono giudicate di livello più che ottimo.

#### VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

L'attività di ricerca del dott. ANTONIO COLUCCIA è caratterizzata dall'applicazione di metodi computazionali nell'identificazione, sviluppo ed ottimizzazione di composti biologicamente attivi, con particolare riferimento alle classi degli antivirali e antitumorali. Tutta la produzione scientifica è coerente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1, e in particolare con le tematiche proprie del settore CHIM/08. La produzione complessiva appare consistente e continuativa nel tempo. Il dott. COLUCCIA è infatti autore di 57 lavori in un arco temporale di 16 anni, con una media di 3,6 lavori/anno. I lavori appaiono su riviste internazionali di ottimo livello e hanno ottenuto un consistente numero di citazioni, con 33 citazioni medie per prodotto e un H index pari a 23. Nel complesso la produzione scientifica del candidato è giudicata più che ottima.

#### **GIUDIZIO COLLEGIALE**

##### TITOLI

Il dott. ANTONIO COLUCCIA è ricercatore a tempo determinato (RTDA) per il settore CHIM/08 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Ha conseguito il Dottorato di ricerca in Scienze Pasteuriane il 25/1/2008 presso l'Università di Roma "La Sapienza". Successivamente ha trascorso un biennio presso la Welsh School of Pharmacy di Cardiff (UK) e tra il 2010 e 2014 ha usufruito di assegni di ricerca erogati dall'Università "La Sapienza". La Commissione valuta la

formazione del candidato, avvenuta sia in Italia che all'estero, di eccellente livello. Dal 2012 il candidato ha svolto con intensità e continuità attività didattica in materie del settore chimico farmaceutico. Dal 2015 ha tenuto la titolarità dell'insegnamento con laboratorio di Analisi chimico farmaceutica e tossicologica I del corso di laurea in Farmacia. Ha partecipato a diversi progetti di ricerca finanziati e nel 2015 ha ottenuto un progetto come coordinatore di progetto. Ha partecipato sia come relatore che come organizzatore a diversi convegni italiani e internazionali. E' co-inventore del brevetto europeo n. EP18305685.2. Nel 2017 ha conseguito l'abilitazione scientifica nazionale alle funzioni di professore di II fascia per il Settore concorsuale 03/D1, Chimica e tecnologie farmaceutiche, tossicologiche e nutraceutico-alimentari (in data 31/03/2017). Il candidato possiede un eccellente curriculum scientifico con pubblicazioni su riviste internazionali ad alto impatto. L'attività di ricerca e la didattica sono pienamente congruenti sia con il settore concorsuale 03/D1 sia con le tematiche del settore chimico farmaceutico oggetto della presente procedura. Complessivamente, la Commissione ritiene che i titoli del candidato siano di livello ottimo.

#### CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLE PUBBLICAZIONI SELEZIONATE

Il candidato dott. ANTONIO COLUCCIA ha presentato 20 pubblicazioni per la valutazione analitica. I 20 lavori sono pubblicati su riviste internazionali ad alto impatto scientifico (IF medio = 5,349) ed hanno ottenuto un ottimo numero di citazioni (citazioni medie per prodotto = 13,3). I lavori riguardano la progettazione, la sintesi e la valutazione biologica di molecole di interesse terapeutico principalmente nel campo dei farmaci antivirali e anticancro. In particolare, il candidato si è occupato degli studi computazionali relativi alla scoperta, all'ottimizzazione e allo sviluppo delle suddette molecole biologicamente attive. Il ruolo del candidato è sempre enucleabile, come si evince dal curriculum complessivo presentato. Il candidato dimostra una buona autonomia scientifica come si evince dai lavori selezionati. Di particolare intensità sono gli studi sugli inibitori della polimerizzazione della tubulina e della trascrittasi inversa di HIV-1. Complessivamente, la Commissione ritiene che le 20 pubblicazioni presentate dal candidato siano di livello più che ottimo.

#### VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica del dott. ANTONIO COLUCCIA è interamente focalizzata sul settore concorsuale 03/D1, e in particolare sulle tematiche del settore scientifico disciplinare CHIM/08. L'attività di ricerca è stata incentrata sullo studio delle strutture, del legame e del comportamento delle *small molecules* nei confronti del target biologico. Lo scopo della ricerca è stato da un lato l'identificazione di nuove molecole di potenziale interesse terapeutico attraverso il design e il virtual screening e dall'altro l'ottimizzazione *hit-to-lead* delle proprietà farmacodinamiche e farmacocinetiche. Le suddette metodologie di computer-aided drug design (CADD) sono state applicate nella ricerca di agenti terapeutici verso svariati tipi di patologie, tra cui le principali sono il cancro e le infezioni virali e batteriche. La produzione complessiva del dott. ANTONIO COLUCCIA è di 57 pubblicazioni scientifiche a stampa in riviste internazionali ad elevato fattore di impatto. La produzione scientifica, considerando l'arco temporale, appare intensa e continuativa. L'H-index del candidato è ottimo (H-index = 23). La Commissione ritiene che la produzione scientifica complessiva del candidato sia di livello più che ottimo.

Indici bibliometrici riportati dal candidato dott. ANTONIO COLUCCIA

Pubblicazioni 57 (SCOPUS 2004-2019)

Citazioni totali 1855

Media citazioni per prodotto 33

Indice Hirsch (H) 23

Indice H normalizzato\* 1,44

\*Indice H diviso per l'età accademica (intervallo di tempo dalla laurea)

**La Commissione, sulla base dei titoli, della valutazione analitica delle 20 pubblicazioni presentate e della produzione scientifica complessiva, tenendo conto dei criteri di massima stabiliti dalla medesima Commissione, esprime un giudizio altamente positivo ai fini della presente procedura di selezione pubblica.**

## CANDIDATO: FRANCESCHIN MARCO

COMMISSARIO 1 - Prof. ROMANO SILVESTRI

### TITOLI

#### Valutazione sui titoli

Dall'analisi del Curriculum si evince che il candidato dott. MARCO FRANCESCHIN è vincitore di concorso pubblico per Dirigente chimico delle professioni sanitarie presso l'Agenzia Italiana del farmaco, dove presta servizio dal 16/6/2011. Il dott. MARCO FRANCESCHIN ha conseguito il Dottorato di ricerca in Scienze chimiche in data 24/02/2005 presso l'Università di Roma "La Sapienza", all'interno del quale ha svolto un periodo (11/01/2004 al 26/06/2004) di attività di ricerca presso il Cancer research UK Biomolecular Structure Group (The School of Pharmacy of London). Il candidato ha acquisito un Diploma di specializzazione all'insegnamento secondario per la classe di concorso A013 (Chimica e tecnologie chimiche). Il 17/6/2016 ha concluso la formazione il Master di II livello in Sostanze organiche naturali presso l'Università di Roma "La Sapienza". Durante l' a.a. 2009/2010 ha frequentato il modulo di Chimica farmaceutica del Master di II livello in Sostanze organiche naturali presso l'Università di Roma "La Sapienza" con uno stage formativo di 6 mesi presso l'Agenzia Italiana del Farmaco (AIFA). Tra il 2004 e il 2010 ha usufruito di assegni di collaborazione per attività di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza". Il candidato acquisito le abilitazioni scientifiche nazionali alle funzioni di professore di II fascia per i Settori concorsuali 03/C1 chimica organica (2014 e 2017) e 03/D1, Chimica e tecnologie farmaceutiche, tossicologiche e nutraceutico-alimentari (2014 e 2015). Il dott. MARCO FRANCESCHIN ha partecipato come organizzatore e relatore a vari Congressi. Ha partecipato a progetti di ricerca finanziati tra il 2002 e il 2013. Ha ricoperto l'incarico per attività di supporto agli studenti in corsi di insegnamento in Chimica organica della Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università di Roma "La Sapienza" negli a.a. 2003/2004, 2004/2005 e 2005/2006, docente del modulo di sostanze naturali di interesse farmaceutico (20 ore) presso IPA San Benedetto (Latina), e come insegnante a titolo gratuito per l'insegnamento della Chimica organica (9 CFU, SSD CHIM/06) per il corso di laurea in Biotecnologie agro-industriali presso la Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università di Roma "La Sapienza" negli a.a. 2014/2015, 2015/2016, 2016/2017 e 2017/2018. Nel loro complesso i titoli del candidato appaiono incentrati sia sul Settore Concorsuale 03/C1 (Chimica organica) che sul 03/D1 (Chimica e tecnologie farmaceutiche, tossicologiche e nutraceutico-alimentari). Nel loro complesso, i titoli del candidato appaiono di ottimo livello.

#### PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. Altieri A, Franceschin M, Nocioni D, Alvino A, Casagrande V, Scarpati ML, Bianco A. Total synthesis of taspine and a symmetrical analogue: study of binding to G-quadruplex DNA by ESI-MS. Eur. J. Org. Chem. 2013, 191-196. IF = 3.154. Citazioni 5 (Scopus).  
**Valutazione: Ottimo.** Il manoscritto riporta la sintesi totale della taspina a partire da acido ferulico e isovanillina. La strategia è stata poi utilizzata per la sintesi dell'analogo simmetrico TAS2C. Entrambi i composti sono stati valutati per la capacità di legare strutture quadruplex e duplex del DNA. Lavoro di sintesi originale eseguito con rigore metodologico. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.
2. Franceschin M, Bombelli C, Borioni S, Bozzuto G, Eleuteri S, Mancini G., Molinari A, Bianco A. A new perylene bisimide bola amphiphile: Synthesis, characterization, fluorescent properties and applications as a potential probe. New J. Chem. 2013, 37, 2166-2173. IF = 3.159. Citazioni (Scopus): 6.  
**Valutazione: Ottimo.** Il lavoro descrive la sintesi e la caratterizzazione di una nuova molecola amfililica, PC12, che è stata valutata in cellule di glioblastoma murino. Il candidato è primo autore. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.



3. Altieri A, Alvino A, Ohnmacht S, Ortaggi G, Neidle S, Nocioni D, Franceschin M, Bianco A. Xanthone and xanthone derivatives as G-Quadruplex stabilizing ligands. *Molecules* 2013, 13446-13470. IF = 2.095. Citazioni (Scopus): 8.  
**Valutazione: Buono.** *Il lavoro descrive la sintesi di derivati xantoni e xantenici con due o tre catene laterali e derivati dimerici a ponte. Tutti i derivati hanno mostrato buon binding con le sequenze telomeriche G-quadruplex. I dati sono stati coerenti con le simulazioni computazionali. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
4. Franceschin M,\* Nocioni D, Biroccio A, Micheli E, Cacchione S, Cingolani C, Venditti A, Zizza P, Bianco A, Altieri A. Design and synthesis of a new dimeric xanthone derivative: enhancement of G-quadruplex selectivity and telomere damage. *Org. Biomol. Chem.* 2014, 12, 9572-9582. IF = 3.562. Citazioni (Scopus): 3.  
**Valutazione: Ottimo.** *Questo lavoro, che rappresenta la continuazione di uno precedente, riporta la progettazione e la sintesi di derivati xantenici dimerizzati. I composti hanno dimostrato un binding al G-Quadruplex migliorato. Il candidato è primo autore. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
5. Porru M, Artuso S, Salvati E, Bianco A, Franceschin M, Diodoro MG, Passeri D, Orlandi A, Savorani F, D'Incalci M, Biroccio A, Leonetti C. Targeting DNA G-quadruplex DNA structures by emicorons has a strong antitumor efficacy against advanced models in human colon cancer. *Mol. Cancer Ther.* 2015, 14, 2451-2551. IF = 5.579. Citazioni (Scopus): 13.  
**Valutazione: Eccellente.** *E' stato studiato l'effetto antitumorale dell'Emicoron in modelli avanzati di tumore del colon retto umano. Il lavoro è essenzialmente a carattere biologico ed è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
6. Micheli E, Altieri A, Cianni L, Cingolani C, Iachettini S, Bianco A, Leonetti C, Cacchione S, Biroccio A, Franceschin M,\* Rizzo A. Perylene and coronene derivatives binding G-rich promoter oncogene sequences efficiently reduce their expression in cancer cells. *Biochimie* 2016, 125, 223-234. IF = 3.112. Citazioni (Scopus): 8.  
**Valutazione: Ottimo.** *Il lavoro descrive il legame di derivati perilenici e coronenici alle strutture G4 e i loro effetti biologici. Il lavoro è essenzialmente a carattere biologico ed è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
7. Porru M, Zizza P, Franceschin M, Leonetti C, Biroccio A. Emicoron: a multi-targeting G4 ligand with a promising preclinical profile. *Biochim. Biophys Acta* 2017, 1861, 1362-1370. IF = 3.679. Citazioni (Scopus): 4.  
**Valutazione: Ottimo.** *Il lavoro evidenzia che il promettente ligando G4 Emicoron possiede un marcato effetto antitumorale sia da solo che in associazione con altri chemioterapici. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
8. Franceschin M,\* Cianni L, Pitorri M, Micheli E, Cacchione S, Frezza C, Serafini M, Hu MH, Su H, Huang Z, Gu L, Bianco A. Natural aromatic compounds as scaffolds to develop selective G-Quadruplex ligands: from previously reported berberine derivatives to new palmatine analogues. *Molecules* 2018, 23, E1423. IF = 3.060. Citazioni (Scopus): 5.  
**Valutazione: Ottimo.** *Il candidato è primo nome del lavoro che riporta lo studio delle interazioni selettive dei due composti naturali, la berberina come ulteriore studio, e la palmatina per la prima volta, con il DNA G-quadruplex. Il lavoro è svolto con rigore metodologico. La tematica è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
9. Frezza C, Venditti A, Sciubba F, Tomai P, Antonetti M, Franceschin M, Di Cocco ME, Gentili A, Delfini M, Serafini M, Bianco A. Phytochemical profile of *Euphorbia peplus* L. collected in central Italy and NMR semiquantitative analysis of the diterpenoid fraction. *J Pharm Biomed Anal* 2018, 160, 152-159. IF = 2.983. Citazioni (Scopus): 4.  
**Valutazione: Ottimo.** *Questo lavoro riporta il profilo fitochimico dell'estratto etanolic della *Euphorbia peplus* L. raccolta in Italia centrale. L'analisi dell'estratto ha portato al riconoscimento di quattordici composti. Il potenziale impiego di questi composti viene discusso. La tematica è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*

10. Pitorri M, Franceschin M,\* Serafini I, Ciccòla A, Frezza C, Bianco A. New developments in the synthesis of emicorons. High Throughput 2018, 7, E22. IF non disponibile. Citazioni (Scopus): 0.  
**Valutazione: Buono.** Il lavoro descrive una migliorata procedura sintetica per l'ottenimento dell'Emicoron, una molecola ad attività antitumorale sintetizzata in precedenza. Il candidato è autore corrispondente della pubblicazione. La tematica è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.
11. Venditti A, Frezza C, Vincenti F, Brodella A, Sciubba F, Montesano C, Franceschin M, Sergi M, Foddai S, Di Cocco ME, Curini R, Delfini M, Bianco A, Serafini M. A syn-ent-labdadiene derivative with a rare spiro- $\beta$ -lactone function from the male cones of *Wollemia nobilis*. Phytochemistry 2019, 158, 91-95. IF = 2018 è 2.905. Citazioni (Scopus): 1.  
**Valutazione: Ottimo.** Il lavoro riporta l'isolamento e l'identificazione di un derivato spiro-labdadienolidico ottenuto dall'estratto della conifera *Wollemia nobilis* e di alcuni suoi metaboliti. La tematica è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.
12. Frezza C, Venditti A, Toniolo C, De Vita D, Serafini I, Ciccòla A, Franceschin M, Ventrone A, Tomassini L, Foddai S, Guiso M, Nicoletti M, Bianco A, Serafini M. *Pedicularis* L. Genus: systematics, botany, phytochemistry, chemotaxonomy, ethnopharmacology and other. Plants 2019, 8, 306. IF 2018 = 2.632. Citazioni (Scopus): non riportato.  
**Valutazione: Buono.** L'articolo è una review sulle piante del genere *Pedicularis*, con particolare enfasi agli aspetti fitochimici ed etnopharmacologici. La tematica è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.

#### VALUTAZIONE SULLE PUBBLICAZIONI SELEZIONATE

Le 12 pubblicazioni presentate dal dott. MARCO FRANCESCHIN ai fini della presente procedura riguardano principalmente ricerche su molecole quali ligandi del G-quadruplex del DNA telomerico. Le pubblicazioni sono riportate in riviste scientifiche internazionali; il loro impatto scientifico (IF) medio di 2,99 e il numero di citazioni medio di 4,3 sono da considerarsi di valore buono. Delle 12 pubblicazioni selezionate, il candidato appare autore corrispondente in 4 e primo autore in 3 di esse, mettendo in luce di aver raggiunto una maturità scientifica di buon livello. In base alle competenze dichiarate nel CV, il ruolo del candidato è enucleabile. Le 12 pubblicazioni presentate dal candidato nel loro complesso appaiono di livello molto buono.

#### VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica dott. MARCO FRANCESCHIN è stata principalmente incentrata sulla sintesi di molecole policicliche aromatiche quali inibitori della telomerasi aventi come target le strutture G-quadruplex del DNA telomerico. La ricerca del dott. MARCO FRANCESCHIN è testimoniata da pubblicazioni di livello molto buono riportate su riviste internazionali (l'IF medio della sua produzione è di 4,08 calcolato sulla base dei dati dichiarati dal candidato) e da due brevetti (più due con domanda decaduta). La produzione scientifica del candidato nel complesso è molto buona.

#### COMMISSARIO 2 - Prof.ssa LUCIANA MARINELLI

#### TITOLI

##### Valutazione sui titoli

Il dott. MARCO FRANCESCHIN ha conseguito il Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche nel 2005 presso l'Università di Roma "La Sapienza". Durante il dottorato ha svolto un periodo di attività di ricerca presso il Cancer Research UK Biomolecular Structure Group di Londra. Dal CV, emerge che attualmente il dott. MARCO FRANCESCHIN presta servizio come Dirigente Chimico delle professioni sanitarie l'AIFA fin dal 16/6/2011. La formazione del candidato è stata integrata da un Diploma di specializzazione all'insegnamento secondario per la classe di concorso A013 (Chimica e tecnologie chimiche), da un Master di II livello in Sostanze organiche naturali presso l'Università di Roma "La Sapienza", e da un modulo di Chimica farmaceutica del Master di II livello in Sostanze

organiche naturali con uno stage formativo di 6 mesi presso l'AIFA. Il candidato è risultato vincitore di assegni di collaborazione per attività di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza" nel periodo 2004-2010. Il dott. MARCO FRANCESCHIN è in possesso delle abilitazioni scientifiche nazionali alle funzioni di professore di II fascia per i Settori concorsuali 03/C1, Chimica organica (2014 e 2017), e 03/D1, Chimica e tecnologie farmaceutiche, tossicologiche e nutraceutico-alimentari (2014 e 2015). Ha svolto attività didattica nel campo della Chimica organica e delle sostanze naturali, ed ha preso parte come organizzatore e relatore a vari congressi. Complessivamente, i titoli del candidato sono di livello ottimo.

#### PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. Altieri A, Franceschin M, Nocioni D, Alvino A, Casagrande V, Scarpati ML, Bianco A. Total synthesis of taspine and a symmetrical analogue: study of binding to G-quadruplex DNA by ESI-MS. *Eur. J. Org. Chem.* 2013, 191-196. IF = 3.154. Citazioni (Scopus): 5.  
**Valutazione: Buono.** *Lavoro a carattere essenzialmente sintetico. Due derivati sono stati testati per il legame con strutture quadruplex e duplex del DNA. Lavoro eseguito con rigore metodologico. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
2. Franceschin M, Bombelli C, Borioni S, Bozzuto G, Eleuteri S, Mancini G., Molinari A, Bianco A. A new perylene bisimide bola amphiphile: Synthesis, characterization, fluorescent properties and applications as a potential probe. *New J. Chem.* 2013, 37, 2166-2173. IF = 3.159. Citazioni (Scopus): 6.  
**Valutazione: Buono.** *Il lavoro con candidato primo autore sulla sintesi della molecola amfilic PC12 testata in cellule di glioblastoma murino. Il lavoro è congruente le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
3. Altieri A, Alvino A, Ohnmacht S, Ortaggi G, Neidle S, Nocioni D, Franceschin M, Bianco A. Xanthene and xanthone derivatives as G-Quadruplex stabilizing ligands. *Molecules* 2013, 13446-13470. IF = 2.095. Citazioni (Scopus): 8.  
**Valutazione: Buono.** *I derivati xantoni e xantenici hanno mostrato di legare le sequenze telomeriche G-quadruplex. Gli studi computazionali sono stati coerenti con i risultati computazionali. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
4. Franceschin M, Nocioni D, Biroccio A, Micheli E, Cacchione S, Cingolani C, Venditti A, Zizza P, Bianco A, Altieri A. Design and synthesis of a new dimeric xanthone derivative: enhancement of G-quadruplex selectivity and telomere damage. *Org. Biomol. Chem.* 2014, 12, 9572-9582. IF = 3.562. Citazioni (Scopus): 3.  
**Valutazione: Buono.** *Il candidato è primo autore di questo lavoro per la progettazione e la sintesi di derivati xantenici dimerizzati che hanno dimostrato un binding al G-Quadruplex migliorato rispetto ai precedenti. Il candidato è primo autore. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
5. Porru M, Artuso S, Salvati E, Bianco A, Franceschin M, Diodoro MG, Passeri D, Orlandi A, Savorani F, D'Incalci M, Biroccio A, Leonetti C. Targeting DNA G-quadruplex DNA structures by emicorons has a strong antitumor efficacy against advanced models in human colon cancer. *Mol. Cancer Ther.* 2015, 14, 2451-2551. IF = 5.579. Citazioni (Scopus): 13.  
**Valutazione: Eccellente.** *Il lavoro riporta l'effetto antitumorale dell'Emicoron in modelli avanzati di tumore del colon retto umano. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
6. Micheli E, Altieri A, Cianni L, Cingolani C, Iachettini S, Bianco A, Leonetti C, Cacchione S, Biroccio A, Franceschin M, Rizzo A. Petylene and coronene derivatives binding G-rich promoter oncogene sequences efficiently reduce their expression in cancer cells. *Biochimie* 2016, 125, 223-234. IF = 3.112. Citazioni (Scopus): 8.  
**Valutazione: Buono.** *Lavoro sullo studio degli effetti biologici di derivati perilenici e coronenici ligandi del G4 e loro effetti biologici. Il lavoro è essenzialmente a carattere biologico.*

7. Porru M, Zizza P, Franceschin M, Leonetti C, Biroccio A. Emicoron: a multi-targeting G4 ligand with a promising preclinical profile. *Biochim. Biophys Acta* 2017, 1861, 1362-1370. IF = 3.679. Citazioni (Scopus): 4.  
**Valutazione: Buono.** *Lavoro svolto in collaborazione con gruppi biologici sulle proprietà antitumorali ligando G4 Emicoron. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
8. Franceschin M, Cianni L, Pitorri M, Micheli E, Cacchione S, Frezza C, Serafini M, Hu MH, Su H, Huang Z, Gu L, Bianco A. Natural aromatic compounds as scaffolds to develop selective G-Quadruplex ligands: from previously reported berberine derivatives to new palmatine analogues. *Molecules* 2018, 23, E1423. IF = 3.060. Citazioni (Scopus): 5.  
**Valutazione: buono.** *Il lavoro riporta uno studio su due composti naturali, la berberina la palmatina, quali ligandi del DNA G-quadruplex. Il candidato appare come primo autore della pubblicazione che si dimostra congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
9. Frezza C, Venditti A, Sciubba F, Tomai P, Antonetti M, Franceschin M, Di Cocco ME, Gentili A, Delfini M, Serafini M, Bianco A. Phytochemical profile of *Euphorbia peplus* L. collected in central Italy and NMR semiquantitative analysis of the diterpenoid fraction. *J Pharm Biomed Anal* 2018, 160, 152-159. IF = 2.983. Citazioni (Scopus): 4.  
**Valutazione: buono.** *Il profilo fitochimico dell'estratto etanoloico della Euphorbia peplus L. è stato analizzato e quattordici composti sono stati riconosciuti. Il loro potenziale impiego terapeutico con applicazioni nell'etnomedicina viene discusso. La tematica è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1, ma meno con quelle dell' SSD CHIM-08.*
10. Pitorri M, Franceschin M, Serafini I, Ciccòla A, Frezza C, Bianco A. New developments in the synthesis of emicorons. *High Throughput* 2018, 7, E22. IF non disponibile. Citazioni (Scopus): 0.  
**Valutazione: Buono.** *Il candidato è corresponding author di questo lavoro che riporta una procedura sintetica migliorata per l'ottenimento dell'antitumorale Emicoron. La tematica è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
11. Venditti A, Frezza C, Vincenti F, Brodella A, Sciubba F, Montesano C, Franceschin M, Sergi M, Foddai S, Di Cocco ME, Curini R, Delfini M, Bianco A, Serafini M. A syn-ent-labdadiene derivative with a rare spiro- $\beta$ -lactone function from the male cones of *Wollemia nobilis*. *Phytochemistry* 2019, 158, 91-95. IF = 2018 è 2.905. Citazioni (Scopus): 1.  
**Valutazione: Buono.** *Il lavoro descrive l'analisi dall'estratto della conifera Wollemia nobilis e di alcuni suoi metaboliti. I composti sono stati isolati e caratterizzati. La tematica è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*
12. Frezza C, Venditti A, Toniolo C, De Vita D, Serafini I, Ciccòla A, Franceschin M, Ventrone A, Tomassini L, Foddai S, Guiso M, Nicoletti M, Bianco A, Serafini M. *Pedicularis* L. Genus: systematics, botany, phytochemistry, chemotaxonomy, ethnopharmacology and other. *Plants* 2019, 8, 306. IF 2018 = 2.632. Citazioni (Scopus): non riportato.  
**Valutazione: Buono.** *La pubblicazione prende in rassegna le piante del genere Pedicularis. Sono stati enfatizzati gli aspetti fitochimici ed etnofarmacologici. La tassonomia del genere è stata discussa. La tematica non è completamente congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*

#### VALUTAZIONE SULLE PUBBLICAZIONI SELEZIONATE

Il dott. MARCO FRANCESCHIN presenta 12 pubblicazioni, su un massimo di 20 presentabili, per la valutazione analitica. Esse riportano, per la maggior parte, studi sulle molecole quali ligandi del G-quadruplex del DNA telomerico. I 12 lavori sono pubblicati su riviste internazionali ad impatto scientifico medio (IF medio = 2,99) con un numero di limitato di citazioni (citazioni medie = 4,3). Il candidato appare come primo autore in 3 delle 12 pubblicazioni presentate, e come autore di riferimento in 4 lavori dei 12 pubblicati, evidenziando di aver raggiunto una più che buona maturità scientifica. Il ruolo del candidato è sempre enucleabile, sulla base delle competenze dichiarate nel CV. Complessivamente, le 12 pubblicazioni presentate dal candidato siano di livello più che buono.

## VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione complessiva del dott. MARCO FRANCESCHIN consta di 32 pubblicazioni indicizzate, l'impact factor medio della sua produzione è di 4.08. La sua attività di ricerca ha riguardato, per la maggior parte, la sintesi di molecole naturali e non dotate di potenziale attività terapeutica. Complessivamente le pubblicazioni sono ben citate (citazioni medie per prodotto = 30), e l'H-index è molto buono (H-index = 18). La produzione scientifica, considerando l'arco temporale, appare continua ma non particolarmente intensa. La produzione complessiva del candidato è comunque di livello ottimo.

## COMMISSARIO 3 - Prof.ssa PAOLA CONTI

### TITOLI

#### Valutazione sui titoli

Il dott. MARCO FRANCESCHIN risulta in servizio dal 16/6/2011 come Dirigente chimico delle professioni sanitarie presso l'AIFA. Nel 2005 ha conseguito il Dottorato di ricerca in Scienze chimiche presso l'Università di Roma "La Sapienza", svolgendo un periodo presso il Cancer research UK Biomolecular Structure Group (Londra). Il candidato ha integrato la propria formazione con un Master di II livello in Sostanze organiche naturali presso l'Università di Roma "La Sapienza", e con un modulo di Chimica farmaceutica del Master di II livello in Sostanze organiche naturali con uno stage formativo di 6 mesi presso l'AIFA. Inoltre il candidato possiede un Diploma di specializzazione all'insegnamento secondario per la classe di concorso A013 (Chimica e tecnologie chimiche). Il dott. MARCO FRANCESCHIN possiede le abilitazioni scientifiche nazionali per professore di II fascia per i Settori concorsuali 03/C1 (Chimica organica, 2014 e 2017) e 03/D1 (Chimica e tecnologie farmaceutiche, tossicologiche e nutraceutico-alimentari, 2014 e 2015). Il candidato ha svolto attività didattica nel settore della Chimica organica e delle sostanze naturali. Dal suo curriculum si evince che il candidato ha svolto con impegno la sua attività di ricerca che ha riguardato principalmente la sintesi di ligandi del G-quadruplex del DNA e più recentemente lo studio di prodotti naturali dotati di attività biologica. Il dott. MARCO FRANCESCHIN ha partecipato come organizzatore e relatore a vari Congressi e ha avuto ruoli organizzativi nell'ambito della SCI. Ha partecipato a diversi progetti di ricerca finanziati ed è co-inventore di due brevetti. I titoli del candidato sono di livello ottimo e nel loro complesso mostrano congruenza con le declaratorie del Settore Concorsuale 03/D1 (Chimica e tecnologie farmaceutiche, tossicologiche e nutraceutico-alimentari) oltre che 03/C1 (Chimica organica).

### PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. Altieri A, Franceschin M, Nocioni D, Alvino A, Casagrande V, Scarpati ML, Bianco A. Total synthesis of taspine and a symmetrical analogue: study of binding to G-quadruplex DNA by ESI-MS. Eur. J. Org. Chem. 2013, 191-196. IF = 3.154. Citazioni (Scopus): 5.  
**Valutazione: Ottimo.** Lavoro di sintesi che ha portato all'ottenimento di due derivati che sono stati testati per il legame con strutture quadruplex e duplex del DNA. Il contributo del candidato è enucleabile sulla base delle competenze scientifiche che si possono evincere dal curriculum. Il lavoro è congruente le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.
2. Franceschin M, Bombelli C, Borioni S, Bozzuto G, Eleuteri S, Mancini G., Molinari A, Bianco A. A new perylene bisimide bola amphiphile: Synthesis, characterization, fluorescent properties and applications as a potential probe. New J. Chem. 2013, 37, 2166-2173. IF = 3.159. Citazioni (Scopus): 6.  
**Valutazione: Ottimo.** Il candidato è primo autore del lavoro, incentrato sulla sintesi della molecola amfifilica PC12 che è stata sperimentata in cellule di glioblastoma murino. Il ruolo del candidato è facilmente enucleabile. La pubblicazione è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.

- Altieri A, Alvino A, Ohnmacht S, Ortaggi G, Neidle S, Nocioni D, Franceschin M, Bianco A. Xanthone and xanthone derivatives as G-Quadruplex stabilizing ligands. *Molecules* 2013, 13446-13470. IF = 2.095. Citazioni (Scopus): 8.

**Valutazione: buono.** *Il lavoro descrive il binding dei derivati sintetizzati al G-quadruplex ed è corredato dagli studi computazionali. Il contributo del candidato è facilmente enucleabile. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*

- Franceschin M, Nocioni D, Biroccio A, Micheli E, Cacchione S, Cingolani C, Venditti A, Zizza P, Bianco A, Altieri A. Design and synthesis of a new dimeric xanthone derivative: enhancement of G-quadruplex selectivity and telomere damage. *Org. Biomol. Chem.* 2014, 12, 9572-9582. IF = 3.562. Citazioni (Scopus): 3.

**Valutazione: ottimo.** *Il lavoro riporta la sintesi di derivati xantenici dimerizzati che hanno dimostrato un binding al G-Quadruplex superiore rispetto ai precedenti derivati. Il contributo del candidato, che è primo autore asteriscato, è facilmente enucleabile. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*

- Porru M, Artuso S, Salvati E, Bianco A, Franceschin M, Diodoro MG, Passeri D, Orlandi A, Savorani F, D'Incalci M, Biroccio A, Leonetti C. Targeting DNA G-quadruplex DNA structures by emicorons has a strong antitumor efficacy against advanced models in human colon cancer. *Mol. Cancer Ther.* 2015, 14, 2451-2551. IF = 5.579. Citazioni (Scopus): 13.

**Valutazione: Ottimo.** *Il lavoro, a prevalente carattere biologico, descrive l'effetto antitumorale di Emicron, un ligando del G-quadruplex, in modelli sperimentali di cancro al colon. Il lavoro è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*

- Micheli E, Altieri A, Cianni L, Cingolani C, Iachettini S, Bianco A, Leonetti C, Cacchione S, Biroccio A, Franceschin M, Rizzo A. Petylene and coronene derivatives binding G-rich promoter oncogene sequences efficiently reduce their expression in cancer cells. *Biochimie* 2016, 125, 223-234. IF = 3.112. Citazioni (Scopus): 8.

**Valutazione: Buono.** *Il lavoro riporta gli effetti biologici di derivati perilenici e coronenici. Il lavoro è prevalentemente di carattere biologico. Il candidato è uno degli autori di riferimento della pubblicazione.*

- Porru M, Zizza P, Franceschin M, Leonetti C, Biroccio A. Emicoron: a multi-targeting G4 ligand with a promising preclinical profile. *Biochim. Biophys Acta* 2017, 1861, 1362-1370. IF = 3.679. Citazioni (Scopus): 4.

**Valutazione: Buono.** *Il lavoro descrive le proprietà antitumorali del ligando G4 Emicoron, anche in associazione con altri antitumorali. Il lavoro ha una forte connotazione biologica.*

- Franceschin M, Cianni L, Pitorri M, Micheli E, Cacchione S, Frezza C, Serafini M, Hu MH, Su H, Huang Z, Gu L, Bianco A. Natural aromatic compounds as scaffolds to develop selective G-Quadruplex ligands: from previously reported berberine derivatives to new palmatine analogues. *Molecules* 2018, 23, E1423. IF = 3.060. Citazioni (Scopus): 5.

**Valutazione: Ottimo.** *Questo lavoro, nel quale il candidato appare come primo nome e asteriscato, descrive le interazioni della berberina e della palmatina con il DNA G-quadruplex. La pubblicazione è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*

- Frezza C, Venditti A, Sciubba F, Tomai P, Antonetti M, Franceschin M, Di Cocco ME, Gentili A, Delfini M, Serafini M, Bianco A. Phytochemical profile of *Euphorbia peplus* L. collected in central Italy and NMR semiquantitative analysis of the diterpenoid fraction. *J Pharm Biomed Anal* 2018, 160, 152-159. IF = 2.983. Citazioni (Scopus): 4.

**Valutazione: Buono.** *Il lavoro presenta quattordici composti identificati dall'analisi dell'estratto etanolic della Euphorbia peplus. Il lavoro ne discute il potenziale impiego come tool farmacologici e terapeutici. Il ruolo del candidato è facilmente enucleabile. La tematica è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.*

- Pitorri M, Franceschin M, Serafini I, Ciccòla A, Frezza C, Bianco A. New developments in the synthesis of emicorons. *High Throughput* 2018, 7, E22. IF non disponibile. Citazioni (Scopus): 0.

**Valutazione: Buono.** Una procedura sintetica ottimizzata nella resa è stata messa a punto per la sintesi dell'Emicoron, una derivato ad azione antitumorale. Il candidato è autore di riferimento della pubblicazione e il suo contributo è facilmente enucleabile. Il lavoro è pubblicato su una rivista senza impact factor. La tematica è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1..

11. Venditti A, Frezza C, Vincenti F, Brodella A, Sciubba F, Montesano C, Franceschin M, Sergi M, Foddai S, Di Cocco ME, Curini R, Delfini M, Bianco A, Serafini M. A syn-ent-labdadiene derivative with a rare spiro- $\beta$ -lactone function from the male cones of *Wollemia nobilis*. *Phytochemistry* 2019, 158, 91-95. IF = 2018 è 2.905. Citazioni (Scopus): 1.

**Valutazione: Buono.** La pubblicazione descrive un derivato spiro-labdadienolidico ottenuto dall'estratto della conifera *Wollemia nobilis* e di alcuni suoi metaboliti. Il contributo del candidato è enucleabile. La tematica è congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.

12. Frezza C, Venditti A, Toniolo C, De Vita D, Serafini I, Ciccòla A, Franceschin M, Ventrone A, Tomassini L, Foddai S, Guiso M, Nicoletti M, Bianco A, Serafini M. *Pedicularis* L. Genus: systematics, botany, phytochemistry, chemotaxonomy, ethnopharmacology and other. *Plants* 2019, 8, 306. IF 2018 = 2.632. Citazioni (Scopus): non riportato.

**Valutazione: Buono.** L'articolo è una review sulle piante del genere *Pedicularis*. Gli aspetti fitochimici ed etnofarmacologici sono enfatizzati. Gli aspetti tassonomici sono stati anche analizzati. La tematica è parzialmente congruente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1.

## VALUTAZIONE SULLE PUBBLICAZIONI SELEZIONATE

Il candidato ha presentato 12 pubblicazioni per la valutazione analitica. In 3 di esse risulta primo autore e in quattro casi è autore di riferimento. In tutti i casi il ruolo del candidato è facilmente enucleabile sulla base delle sue competenze scientifiche, che si possono evincere dal curriculum. La produzione scientifica del dott. MARCO FRANCESCHIN è incentrata principalmente sugli inibitori della telomerasi aventi come target le strutture G-quadruplex del DNA telomerico. Presenta inoltre alcuni lavori incentrati su tematiche di fitochimica. Tutte le ricerche descritte sono state svolte con apprezzabile rigore metodologico. Le pubblicazioni scientifiche appaiono generalmente coerenti con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1. Le pubblicazioni presentate sono riportate su riviste internazionali con un buon indice di impatto, anche se una di esse appare su una rivista senza impact factor. Nel complesso le pubblicazioni presentate sono giudicate di livello più che buono.

## VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

L'attività di ricerca del dott. MARCO FRANCESCHIN è principalmente caratterizzata dalla sintesi di molecole biologicamente attive, con particolare riferimento a inibitori della telomerasi aventi come target le strutture G-quadruplex del DNA telomerico. Si è inoltre occupato della caratterizzazione di sostanze organiche naturali e di metaboliti secondari a potenziale attività biologica. La produzione scientifica è coerente con le declaratorie del settore concorsuale 03/D1. La produzione complessiva appare continuativa nel tempo anche se non particolarmente intensa, infatti ha pubblicato 32 lavori indicizzati in un arco temporale di 18 anni, con una media di 1,8 lavori/anno. I lavori appaiono su riviste internazionali di ottimo livello e hanno ottenuto un consistente numero di citazioni, con 30 citazioni medie per prodotto e un H index pari a 18. Nel complesso la produzione scientifica del candidato è giudicata ottima.

## **GIUDIZIO COLLEGIALE**

### TITOLI

Dal CV, risulta che il dott. MARCO FRANCESCHIN presta servizio come Dirigente chimico delle professioni sanitarie presso l'AIFA dal 16/6/2011. Il candidato ha conseguito il Dottorato di ricerca in

Scienze chimiche nel 2005 presso l'Università di Roma "La Sapienza". La Commissione valuta la sua formazione di eccellente livello avvenuta principalmente in Italia e in parte anche all'estero. Il candidato ha svolto attività didattica nel settore della chimica organica dal 2014 al 2018 e delle sostanze naturali nel 2008. Ha partecipato a diversi progetti di ricerca finanziati tra il 2001 e il 2009 (terminato nel 2013). Ha partecipato sia come relatore che come organizzatore a diversi convegni italiani e internazionali, ed ha avuto ruoli organizzativi all'interno della Società chimica italiana. È co-inventore dei brevetti Italiani n. IT1379093 e IT1415337 convertiti in due domande di brevetto internazionale. Ha ottenuto il riconoscimento di Most Cited Paper Award della rivista *Biorg. & Med. Chem.* (edizioni 2005-2008 e 2006-2009). Il dott. MARCO FRANCESCHIN è in possesso delle abilitazioni scientifiche nazionali alle funzioni di professore di II fascia per i Settori concorsuali 03/C1, Chimica organica (2014 e 2017), e 03/D1, Chimica e tecnologie farmaceutiche, tossicologiche e nutraceutico-alimentari (2014 e 2015). L'attività didattica è principalmente incentrata sulla chimica organica. L'attività di ricerca è congruente sia con il settore concorsuale 03/D1 sia con le tematiche del settore chimico farmaceutico oggetto della presente procedura. Complessivamente, la Commissione ritiene che i titoli del candidato siano di livello ottimo.

### CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Il candidato dott. MARCO FRANCESCHIN ha presentato 12 pubblicazioni per la valutazione analitica. I 12 lavori sono pubblicati su riviste internazionali ad impatto scientifico medio (IF medio = 2,99) con un numero di citazioni non elevato (citazioni medie = 4,3). L'attività scientifica è stata principalmente incentrata sulla sintesi di derivati policiclici quali inibitori della telomerasi aventi come target le strutture G-quadruplex del DNA telomerico. Più recentemente essa è stata rivolta verso l'isolamento e la caratterizzazione di sostanze naturali ottenute da estratti di piante. Il ruolo del candidato è enucleabile, sulla base delle competenze dichiarate nel CV. Il candidato dimostra una più che buona autonomia scientifica come si evince dai lavori presentati. Complessivamente, la Commissione ritiene che le 12 pubblicazioni presentate dal candidato siano di livello più che buono.

### VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

L'attività di ricerca del dott. MARCO FRANCESCHIN ha riguardato la sintesi di varie classi di molecole policicliche, quali nuovi inibitori della telomerasi per lo sviluppo di potenziali antitumorali e antivirali. Il candidato ha inoltre contribuito a lavori riguardanti la caratterizzazione di sostanze organiche naturali e di metaboliti secondari a potenziale attività biologica. Sulla base della documentazione riportata nel CV, la produzione complessiva del dott. MARCO FRANCESCHIN consta di 36 pubblicazioni scientifiche a stampa su riviste internazionali, 2 pubblicazioni su riviste nazionali, 4 contributi in volume (di cui 2 capitoli e 2 articoli). I dati scientometrici dichiarati dal candidato si riferiscono a 32 pubblicazioni scientifiche a stampa indicizzate su riviste internazionali ad elevato fattore di impatto (IF medio = 4.08) e ben citate (citazioni medie per prodotto = 30). La produzione scientifica, considerando l'arco temporale, appare continua ma non particolarmente intensa. L'H-index del candidato è molto buono (H-index = 18). La Commissione ritiene che la produzione complessiva del candidato sia di livello ottimo.

Indici bibliometrici riportati dal candidato dott. MARCO FRANCESCHIN

Pubblicazioni 32 (SCOPUS 2002-2019)

Impact factor totale<sup>1</sup> 130,677

Citazioni totali 962

Media citazioni per prodotto<sup>2</sup> 30.06

Indice Hirsch (H) 18

Indice H normalizzato\* 1

\*Indice H diviso per l'età accademica 2002-2019 = 18 anni)

<sup>1</sup>Include un articolo non ancora presente su Scopus, ma esclude un articolo su rivista con IF non ancora disponibile, ma presente in Scopus.

<sup>2</sup>Calcolato su 32 articoli internazionali presenti in Scopus

**La Commissione, sulla base dei titoli, della valutazione analitica delle 12 pubblicazioni presentate e della produzione scientifica complessiva, tenendo conto dei criteri di massima stabiliti dalla medesima Commissione, esprime un giudizio positivo ai fini della presente**



**procedura di selezione pubblica.**

La Commissione termina i propri lavori alle ore 18:30 del 23 marzo 2020.

Letto, approvato e sottoscritto.

Firma del Commissari

Prof. Romano Silvestri, Presidente \_\_\_\_\_

Prof.ssa Luciana Marinelli, Componente \_\_\_\_\_

Prof.ssa Paola Conti, Segretario \_\_\_\_\_