

ALLEGATO N. 3A DEL VERBALE 3
GIUDIZI INDIVIDUALI E COLLEGIALI

PROCEDURA SELETTIVA PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 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" BANDITA CON D.D. N. 1250 DEL 03/07/2018

L'anno 2018, il giorno 15 del mese di novembre in Roma si è riunita nei locali del Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 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", nominata con D.D. n. 1627/2018 del 18/09/2018 e composta da:

- Prof. DI SANTO Roberto – professore straordinario presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza"
- Prof. CAMPIGLIA Pietro – professore ordinario presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università degli Studi di Salerno
- Prof.^{ssa} RIVARA Silvia – professore associato presso il Dipartimento di Scienze degli Alimenti e del Farmaco dell'Università degli Studi di Parma

Tutti i componenti della Commissione sono collegati per via telematica (via skype).

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 9.00 e procede ad elaborare la valutazione dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati.

CANDIDATO: DE VITA DANIELA

COMMISSARIO 1
Prof. Roberto Di Santo

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2008.
2. Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche conseguita presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2004.
3. Tutoraggio di chimica generale ed inorganica Facoltà di Ingegneria Università di Roma "La Sapienza", AA 2008/09.
4. Insegnamento a contratto di Chimica Generale ed Inorganica presso il Dipartimento di Scienze Ecologiche E Biologiche (DEB) dell'Università Tuscia di Viterbo, per il corso di Scienze Ambientali, l'AA 2012/2013.
5. Collaborazione Coordinata e Continuativa (CO.CO.CO.), presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 02/04/2008 al 02/04/2009.
6. CO.CO.CO. presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 01/09/2010 al 28/02/2011.
7. CO.CO.CO. presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 01/03/2011 al 31/08/2011.

8. Incarico di lavoro autonomo presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", Novembre 2011.
9. Incarico di lavoro autonomo presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 01/10/2012 al 31/10/2012.
10. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 02/05/2013 al 31/05/2014.
11. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma dal 01/06/2014 al 31/05/2015.
12. Borsa PostDoc presso l'Istituto di Chimica di Sao Carlos dell'Università di San Paolo (Brasile) dal 01/03/2016 al 30/04/2018.
13. 3 Comunicazioni orali e 9 poster a Congressi.
14. Lettera di Presentazione del Prof. Carlos Montanari.

Valutazione dei titoli

La candidata DE VITA ha conseguito la Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" nel 2004, e il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche presso lo stesso Ateneo, nel 2008, difendendo una tesi dal titolo: Derivati della 4-ammino piridina come potenziali inibitori delle colinesterasi. Ha svolto attività didattica come tutor in Chimica Generale ed Inorganica presso la Facoltà di Ingegneria, Università di Roma "La Sapienza" nell'AA 2009/10 ed ha avuto un incarico come docente a Contratto presso il Dipartimento di Scienze Ecologiche e Biologiche (DEB) dell'Università Tuscia di Viterbo, per il corso di Scienze Ambientali, nell'AA 2012/2013. Ha avuto contratti CoCoCo e incarichi di lavoro autonomo presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 02/04/2008 al 02/04/2009, dal 01/09/2010 al 28/02/2011, dal 01/03/2011 al 31/08/2011, nel Novembre 2011 e dal 01/10/2012 al 31/10/2012. Ha avuto successivamente due assegni di ricerca dal 02/05/2013 al 01/05/2014 e dal 01/06/2014 al 31/05/2015 sempre presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza". Ottiene poi un PostDoc presso l'Istituto di Chimica di Sao Carlos (SP, Brasile) dell'Università di San Paolo (USP) dal 01/03/2016 al 30/04/2018. E' stata relatrice orale a 3 congressi e ha presentato 9 poster. E' positivamente presentata dal Prof. Carlos Montanari IQSC, dell'Università di San Paolo Brasile.

L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata mette in luce un profilo curriculare di ottimo livello, sia per quanto riguarda la continuità temporale dell'attività di ricerca svolta, che è congruente con il SSD oggetto del concorso e con linee di ricerca indicate nel bando, che per l'attività didattica che le è stata affidata.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

1) Cianni, L., Sartori, G., Rosini, F., De Vita, D., Pires, G., Lopes, B.R., Leitao, A., Burtoloso, A.C.B., Montanari, C.A. (2018) *Bioorg. Chem.* 79, pp. 285-292. *Il lavoro descrive la sintesi di una serie di nuovi inibitori della cruzaina a struttura dipeptidica. Vengono valutati in silico l'interazione con il residuo della Serina 61 dell'enzima e vengono riportati studi di cinetica e termodinamica. Il lavoro è originale e rilevante nel campo dei potenziali agenti antitripanosomici. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 Chemistry, Organic).*

2) Saccoliti, F., Madia, V.N., Tudino, V., De Leo, A., Pescatori, L., Messori, A., De Vita, D., Scipione, L., Brun, R., Kaiser, M., Maser, P., Calvet, C.M., Jennings, G.K., Podust, L.M., Costi, R., Di Santo, R. (2018) *Eur. J. Med. Chem.* 156, 53-60. *Il lavoro descrive il riposizionamento di alcuni agenti antifungini azolici nel campo dei composti ad azione antiprotozoaria e ne viene valutata anche l'attività in vivo. Il lavoro è ben strutturato e molto rilevante nel settore dei farmaci antitripanosomici. E' pubblicato in una rivista di*

ottimo livello (Q1).

3) Silva, D.G., Ribeiro, J.F.R., De Vita, D., Cianni, L., Franco, C.H., Freitas-Junior, L.H., Moraes, C.B., Rocha, J.R., Burtoloso, A.C.B., Kenny, P.W., Leitao, A., Montanari, C.A. (2017) *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 27, 5031-5035.

La pubblicazione riguarda lo studio su alcuni peptidi che inibiscono la cruzaina. Viene proposta una trasformazione di un gruppo funzionale importante per l'inibizione dell'enzima, da nitrile ad altri raggruppamenti molecolari. La pubblicazione è rilevante nell'ambito della ricerca su nuovi antiprotozoari. Lo studio è condotto con metodologia rigorosa e pubblicato su una rivista di buon impatto (Q2).

4) De Vita, D., Angeli, A., Pandolfi, F., Bortolami, M., Costi, R., Di Santo, R., Suffredini, E., Ceruso, M., Del Prete, S., Capasso, C., Scipione, L., Supuran, C.T. (2017) *J. Enz. Inhib. Med. Chem.*, 32, 798-804. *Il lavoro descrive la scoperta di nuove ammidi e solfonammidi come inibitori dell'anidrasi carbonica del Vibrio Cholerae. Il lavoro è molto interessante perché propone un target alternativo per combattere il vibrione e i batteri in generale. E' condotto con buon rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

5) De Vita, D., Pandolfi, F., Cirilli, R., Scipione, L., Di Santo, R., Friggeri, L., Mori, M., Fiorucci, D., Maccari, G., Christopher, R.S.A., Zamperini, C., Pau, V., De Logu, A., Tortorella, S., Botta, M. (2016) *Eur. J. Med. Chem.* 121, 169-180. *In questo lavoro è riportato uno screening di un set di derivati azolici nei confronti di protozoi patologici. E' inoltre riportato uno studio di docking molecolare per definire l'interazione tra tali inibitori e il target molecolare. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

6) De Vita, D., Moraca, F., Zamperini, C., Pandolfi, F., Di Santo, R., Matheeußen, A., Maes, L., Tortorella, S., Scipione L. (2016) *Eur. J. Med. Chem.* 113, 28-33. *La pubblicazione descrive un ligand based approach per l'individuazione di composti attivi nei confronti del Mycobacterium Tuberculosis. Le molecole sono state selezionate a partire da due banche dati pubbliche e da una library in house. Il lavoro è condotto con rigore metodologico e ha notevole rilevanza nell'ambito dei composti che possono essere utili a combattere la tubercolosi. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

7) De Vita, D., Simonetti, G., Pandolfi, F., Costi, R., Di Santo, R., D'Auria, F.D., Scipione L. (2016) *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 26, 5931-5935. *Il lavoro descrive la sintesi di alcuni esteri e ammidi cinnamoiliche attive nei confronti del biofilm in formazione di Candida Albicans. Il lavoro è ben condotto e risulta importante per l'emergente problema della formazione di biofilm fungini ed è pubblicato su una rivista di medio livello (Q3).*

8) Friggeri, L., Hargrove, T.Y., Rachakonda, G., Williams, A.D., Wawrzak, Z., Di Santo, R., De Vita, D., Waterman, M.R., Tortorella, S., Villalta, F., Lepesheva, G.I. (2014) *J. Med. Chem.* 57, 6704-6717. *Il lavoro descrive la sintesi di nuovi derivati β -fenilimidazolici. Di tali derivati è valutata la potenza come agenti antiparassitari, l'effetto inibitorio nei confronti del CYP51 e sono definiti studi strutturali per definire le interazioni chiave con il target. Questo lavoro è molto rilevante nell'ambito della ricerca su composti attivi nei confronti dei protozoi, in particolare T. cruzi, e trova la sua collocazione editoriale in una rivista di ottimo livello (Q1).*

9) De Vita, D., Friggeri, L., D'Auria, F.D., Pandolfi, F., Piccoli, F., Panella, S., Palamara, A.T., Simonetti, G., Scipione, L., Di Santo, R., Costi, R., Tortorella, S. (2014) *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 24, 1502-1505. *Il lavoro descrive l'attività inibitrice nei confronti del biofilm fungino di Candida albicans dell'acido caffeico e di alcuni suoi derivati esterei. E' condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di medio livello (Q3).*

10) Friggeri, L., Scipione, L., Costi, R., Kaiser, M., Moraca, F., Zamperini, C., Botta, B., Di Santo, R., De Vita, D., Brun, R., Tortorella, S. (2013) *ACS Med. Chem. Lett.* 4, 538-541. *Il lavoro descrive la sintesi e l'attività antiprotozoaria di una serie di azoli e amminopirimidine che risultano attive nei confronti di T. cruzi. Il lavoro è ben concepito e è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

11) Mellini, P., Carafa, V., Di Rienzo, B., Rotili, D., De Vita, D., Cirilli, R., Gallinella, B., Provisiero, D.P., Di Maro, S., Novellino, E., Altucci, L., Mai, A. (2012) ChemMedChem, 7, 1905-1908. *La pubblicazione riguarda la sintesi di derivati del carprofene come inibitori della sirtuina. Se ne riportano sia gli studi di inibizione enzimatica che l'attività su cellula. Il lavoro è svolto con rigore metodologico e pubblicato su una rivista di buon livello (Q2).*

12) De Vita, D., Scipione, L., Tortorella, S., Mellini, P., Di Rienzo, B., Simonetti, G., D'Auria, F.D., Panella, S., Cirilli, R., Di Santo, R., Palamara, A.T. (2012) Eur. J. Med. Chem. 49, 334-342. *In questo lavoro è descritta l'attività antifungina di alcuni esteri aromatici e carbammati a struttura imidazolifenil etanolica. E' affrontato anche l'aspetto stereochimico, mediante separazione enantioselettiva in modo da definire l'eutomero della coppia. Il lavoro è condotto con buon rigore metodologico, ed è rilevante nel campo dei farmaci antifungini. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La candidata DE VITA presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, 3 comunicazioni orali e 9 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

La candidata DE VITA presenta pubblicazioni originali, innovative e nelle quali si denota rigore metodologico. Tali pubblicazioni presentano una buona rilevanza considerando il panorama scientifico internazionale. La produzione è congruente con il SSD CHIM/08 e con le tematiche indicate nel bando. La produzione globalmente è quantificabile in 27 pubblicazioni, per le quali la candidata dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 8$; Citazioni totali = 183; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 6,78; IF Totale (27 pubblicazioni) = 91,55. IF Medio: 3,39. La produzione scientifica è globalmente ottima, continua nel tempo e riportata su riviste a diffusione internazionale dotate prevalentemente di ottima collocazione editoriale e diffusione all'interno della comunità scientifica. L'apporto individuale è facilmente enucleabile nelle numerose pubblicazioni (7 su 12) nelle quali la candidata è autore di riferimento o primo nome. La candidata inoltre ha presentato i propri risultati scientifici in 3 Comunicazioni orali e 9 presentazioni poster a Congressi. La candidata ha raggiunto pertanto un ottimo livello scientifico che la pone in posizione idonea a ricoprire posizioni di rilievo nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08.

COMMISSARIO 2

Prof. Pietro Campiglia

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2008.
2. Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche conseguita presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2004.
3. Tutoraggio di chimica generale ed inorganica Facoltà di Ingegneria Università di Roma "La Sapienza", AA 2008/09.
4. Insegnamento a contratto di Chimica Generale ed Inorganica presso il Dipartimento di Scienze Ecologiche E Biologiche (DEB) dell'Università Tuscia di Viterbo, per il corso di Scienze Ambientali, l'AA 2012/2013.
5. Collaborazione Coordinata e Continuativa (CO.CO.CO.), presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 02/04/2008 al 02/04/2009.

6. CO.CO.CO. presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 01/09/2010 al 28/02/2011.
7. CO.CO.CO. presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 01/03/2011 al 31/08/2011.
8. Incarico di lavoro autonomo presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", Novembre 2011.
9. Incarico di lavoro autonomo presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 01/10/2012 al 31/10/2012.
10. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 02/05/2013 al 31/05/2014.
11. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma dal 01/06/2014 al 31/05/2015.
12. Borsa PostDoc presso l'Istituto di Chimica di Sao Carlos dell' Università di San Paolo (Brasile) dal 01/03/2016 al 30/04/2018.
13. 3 Comunicazioni orali e 9 poster a Congressi.
14. Lettera di Presentazione del Prof. Carlos Montanari.

Valutazione sui titoli

La candidata De Vita ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche nel 2008, apparentemente trattando argomenti di ricerca che risultano inerenti il SSD oggetto del presente concorso, anche se non è stato possibile valutarne la consistenza per mancanza del manoscritto della Tesi di Dottorato. Tutte le attività successive al dottorato, rappresentate da Collaborazioni Coordinate e Continuative, incarichi di lavoro autonomi ed assegni di ricerca sono, parimenti, inerenti il SSD oggetto del presente concorso e congruenti con le tematiche del bando, così come l'attività di ricerca svolta all'Estero. La candidata dichiara di aver eseguito attività didattica presso l'Università della Tuscia di Viterbo e risulta titolare di 3 comunicazioni orali e di 9 poster a Congresso. Il giudizio in merito ai titoli presentati è buono.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

- 1) Cianni, L., Sartori, G., Rosini, F., De Vita, D., Pires, G., Lopes, B.R., Leitao, A., Burtoloso, A.C.B., Montanari, C.A. (2018) *Bioorg. Chem.* 79, pp. 285-292. *Il lavoro descrive la sintesi di nuovi dipeptidi inibitori del sottotipo della cruzaina. E' effettuato un lavoro in silico di interazione farmaco-recettore, nonché studi di cinetica e termodinamica. Il lavoro è originale e rilevante nell'ambito di riferimento. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 Chemistry, Organic)*
- 2) Saccoliti, F., Madia, V.N., Tudino, V., De Leo, A., Pescatori, L., Messori, A., De Vita, D., Scipione, L., Brun, R., Kaiser, M., Maser, P., Calvet, C.M., Jennings, G.K., Podust, L.M., Costi, R., Di Santo, R. (2018) *Eur. J. Med. Chem.* 156, 53-60. *Il lavoro descrive un processo di drug-repositioning di nuclei azolici ad originale attività antifungina nel campo degli antiprotozoari, con conseguente valutazione farmacologica in vivo. Il lavoro è originale, persegue rigore scientifico ed è molto rilevante nel settore drug discovery. E' pubblicato in una rivista di primissimo livello (Q1).*
- 3) Silva, D.G., Ribeiro, J.F.R., De Vita, D., Cianni, L., Franco, C.H., Freitas-Junior, L.H., Moraes, C.B., Rocha, J.R., Burtoloso, A.C.B., Kenny, P.W., Leitao, A., Montanari, C.A. (2017) *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 27, 5031-5035. *La pubblicazione è inerente lo sviluppo di inibitori peptidici della cruzaina basata sulla trasformazione di un gruppo funzionale importante per l'inibizione dell'enzima finalizzato a diversificare strutturalmente le molecole massimizzando l'attività inibitoria. La pubblicazione è di ottimo livello, ben strutturata da un punto di vista scientifico e rilevante nell'ambito di riferimento. Lo studio è pubblicato su una rivista di buon impatto (Q2).*

- 4) De Vita, D., Angeli, A., Pandolfi, F., Bortolami, M., Costi, R., Di Santo, R., Suffredini, E., Ceruso, M., Del Prete, S., Capasso, C., Scipione, L., Supuran, C.T. (2017) *J. Enz. Inhib. Med. Chem.*, 32, 798-804. *Il lavoro è basato sull'identificazione di nuove molecole di natura ammidica e solfonammidica inibitori di un sottotipo recettoriale dell'anidrasi carbonica caratteristica del Vibrio Cholerae. Il lavoro è molto interessante perché definisce una strategia innovativa per il trattamento farmacologico del patogeno. E' condotto con buon rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 5) De Vita, D., Pandolfi, F., Cirilli, R., Scipione, L., Di Santo, R., Friggeri, L., Mori, M., Fiorucci, D., Maccari, G., Christopher, R.S.A., Zamperini, C., Pau, V., De Logu, A., Tortorella, S., Botta, M. (2016) *Eur. J. Med. Chem.* 121, 169-180. *In questo lavoro sono sviluppati potenziali antiprotozoari a nucleo azolico. Lo studio comprende una parte in silico di docking molecolare atta a definire le principali interazioni farmaco-recettoriali rilevate. Il lavoro è caratterizzato da buona originalità e rigore metodologico. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 6) De Vita, D., Moraca, F., Zamperini, C., Pandolfi, F., Di Santo, R., Matheeuessen, A., Maes, L., Tortorella, S., Scipione L. (2016) *Eur. J. Med. Chem.* 113, 28-33. *In questo lavoro, tramite un approccio ligand-based che sfrutta due data bank ed una libreria molecolare in-house, sono individuati una serie di derivati attivi nei confronti del Mycobacterium Tuberculosis. Il lavoro è condotto con rigore metodologico e ha assoluta rilevanza nell'ambito dei composti antitubercolari. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 7) De Vita, D., Simonetti, G., Pandolfi, F., Costi, R., Di Santo, R., D'Auria, F.D., Scipione L. (2016) *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 26, 5931-5935. *Il lavoro è pubblicato su di una rivista di medio livello (Q3) e descrive l'attività anti-candida di derivati dell'acido cinnamico tramite l'opposizione alla formazione di biofilm. La ricerca è ben condotta ed i risultati di sufficiente rilevanza per l'ambito scientifico di riferimento.*
- 8) Friggeri, L., Hargrove, T.Y., Rachakonda, G., Williams, A.D., Wawrzak, Z., Di Santo, R., De Vita, D., Waterman, M.R., Tortorella, S., Villalta, F., Lepesheva, G.I. (2014) *J. Med. Chem.* 57, 6704-6717. *Il lavoro descrive la sintesi il design razionale di derivati β -fenilimidazolici in qualità di agenti anti-tripanosoma. La loro potenza è valutata e razionalizzata dal un punto di vista delle relazioni struttura-attività. E' inoltre definito l'effetto inibitorio nei confronti del citocromo CYP51. Questo lavoro è ben condotto, particolarmente rilevante nell'ambito scientifico di riferimento ed è pubblicato su di una rivista di primo livello (Q1).*
- 9) De Vita, D., Friggeri, L., D'Auria, F.D., Pandolfi, F., Piccoli, F., Panella, S., Palamara, A.T., Simonetti, G., Scipione, L., Di Santo, R., Costi, R., Tortorella, S. (2014) *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 24, 1502-1505. *Il lavoro è pubblicato su di una rivista di medio livello (Q3) e descrive l'attività anti-candida di derivati dell'acido caffeico tramite l'opposizione alla formazione di biofilm. La ricerca è ben condotta ed i risultati di sufficiente rilevanza per l'ambito scientifico di riferimento.*
- 10) Friggeri, L., Scipione, L., Costi, R., Kaiser, M., Moraca, F., Zamperini, C., Botta, B., Di Santo, R., De Vita, D., Brun, R., Tortorella, S. (2013) *ACS Med. Chem. Lett.* 4, 538-541. *Il lavoro è incentrato sulla sintesi e l'attività antiprotozoaria di una serie di composti azolici e amminopirimidinici attivi verso Tripanosoma cruzi. Il lavoro è ben concepito, ottimamente svolto e pubblicato su una rivista di primissimo livello (Q1).*
- 11) Mellini, P., Carafa, V., Di Rienzo, B., Rotili, D., De Vita, D., Cirilli, R., Gallinella, B., Provisiero, D.P., Di Maro, S., Novellino, E., Altucci, L., Mai, A. (2012) *ChemMedChem*, 7, 1905-1908. *Il lavoro tratta della sintesi di derivati del carprofene agenti come inibitori della sirtuina. Di tali derivati è valutata la potenza in vitro e l'attività in cellula. Il lavoro è ben effettuato da un punto di vista scientifico, presenta una buona rilevanza nell'ambito scientifico di riferimento ed è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2).*

12) De Vita, D., Scipione, L., Tortorella, S., Mellini, P., Di Rienzo, B., Simonetti, G., D'Auria, F.D., Panella, S., Cirilli, R., Di Santo, R., Palamara, A.T. (2012) Eur. J. Med. Chem. 49, 334-342. *In questo lavoro è descritta l'attività antifungina di alcuni esteri aromatici e carbammati a struttura imidazolifenil etanolica. E affrontato anche l'aspetto stereochimico, mediante separazione enantioselettiva in modo da definire l'eutomero della coppia. Il lavoro è condotto con buon rigore metodologico, ed è rilevante nel campo dei farmaci antifungini. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La candidata DE VITA presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, 3 comunicazioni orali e 9 poster a congressi.

Valutazione sulla produzione complessiva

La candidata DE VITA presenta pubblicazioni caratterizzate da una buona rilevanza internazionale. La produzione è congruente con il SSD di riferimento del presente concorso (CHIM/08). La produzione complessiva (27 pubblicazioni) presenta, come da dichiarazione della candidata i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 8$; Citazioni totali = 183; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 6,78; IF Totale (27 pubblicazioni) = 91,55. IF Medio: 3,39. La produzione totale è di assoluta rilevanza internazionale e continua nel tempo. L'apporto individuale della candidata è evidente, considerando le numerose pubblicazioni (7 su 12) nelle quali la candidata risulta autore di riferimento o primo autore. Lo stesso dicasi per le 3 Comunicazioni orali e le 9 presentazioni poster a Congressi. Le pubblicazioni presentate evidenziano che la candidata ha maturato buona esperienza e competenze in ambiti attinenti alle tematiche richieste nel bando del presente concorso.

COMMISSARIO 3

Prof.ssa Silvia Rivara

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2008.
2. Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche conseguita presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2004.
3. Tutoraggio di chimica generale ed inorganica Facoltà di Ingegneria Università di Roma "La Sapienza", AA 2008/09.
4. Insegnamento a contratto di Chimica Generale ed Inorganica presso il Dipartimento di Scienze Ecologiche E Biologiche (DEB) dell'Università Tuscia di Viterbo, per il corso di Scienze Ambientali, l'AA 2012/2013.
5. Collaborazione Coordinata e Continuativa (CO.CO.CO.), presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 02/04/2008 al 02/04/2009.
6. CO.CO.CO. presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 01/09/2010 al 28/02/2011.
7. CO.CO.CO. presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 01/03/2011 al 31/08/2011.
8. Incarico di lavoro autonomo presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", Novembre 2011.
9. Incarico di lavoro autonomo presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 01/10/2012 al 31/10/2012.

10. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 02/05/2013 al 31/05/2014.
11. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma dal 01/06/2014 al 31/05/2015.
12. Borsa PostDoc presso l'Istituto di Chimica di Sao Carlos dell'Università di San Paolo (Brasile) dal 01/03/2016 al 30/04/2018.
13. 3 Comunicazioni orali e 9 poster a Congressi.
14. Lettera di Presentazione del Prof. Carlos Montanari.

Valutazione sui titoli

La candidata DE VITA ha completato gli studi presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" laureandosi nel 2004 in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche e conseguendo il dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche nel 2008 con una tesi dal titolo: Derivati della 4-ammino piridina come potenziali inibitori delle colinesterasi. Ha svolto attività didattica nell'a.a. 2009-10 presso la Facoltà di Ingegneria, Università di Roma "La Sapienza" come tutor di Chimica generale e in seguito nell'a.a. 2012-13 come docente a Contratto per il corso di Scienze Ambientali presso il Dipartimento di Scienze Ecologiche e Biologiche (DEB) dell'Università Tuscia di Viterbo.

Ha svolto diversi contratti CoCoCo e incarichi di lavoro autonomo presso l'Università di Roma "La Sapienza" per periodi discontinui dal 2008 al 2012. Negli anni 2013-14 e 2014-15 ha lavorato come assegnista di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza". Infine dal 2016 all'aprile 2018 è stata PostDoc presso l'Istituto di Chimica di Sao Carlos (SP, Brasile) dell'Università di San Paolo (USP). L'attività congressuale presentata consta di 3 comunicazioni orali e di 9 poster.

La candidata ha presentato titoli che evidenziano un ottimo profilo curricolare ed un'attività di ricerca coerente con il SSD oggetto del presente concorso e congruente con le tematiche del bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1) Cianni, L., Sartori, G., Rosini, F., De Vita, D., Pires, G., Lopes, B.R., Leitao, A., Burtoloso, A.C.B., Montanari, C.A. (2018) *Bioorg. Chem.* 79, pp. 285-292. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 Chemistry, Organic) riporta la sintesi di nuovi inibitori dell'enzima cruzaina e la caratterizzazione dell'interazione target-inibitore, nell'ambito dello sviluppo di potenziali agenti antitripanosomiaci. Il lavoro è originale e rilevante nell'ambito di riferimento.*

2) Saccoliti, F., Madia, V.N., Tudino, V., De Leo, A., Pescatori, L., Messori, A., De Vita, D., Scipione, L., Brun, R., Kaiser, M., Maser, P., Calvet, C.M., Jennings, G.K., Podust, L.M., Costi, R., Di Santo, R. (2018) *Eur. J. Med. Chem.* 156, 53-60. *Il lavoro, originale e di impatto nel campo degli agenti antiprotozoari, descrive la valutazione di derivati azolici ad azione nota antifungina come potenziali farmaci antitripanosomiaci. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo impatto (Q1).*

3) Silva, D.G., Ribeiro, J.F.R., De Vita, D., Cianni, L., Franco, C.H., Freitas-Junior, L.H., Moraes, C.B., Rocha, J.R., Burtoloso, A.C.B., Kenny, P.W., Leitao, A., Montanari, C.A. (2017) *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 27, 5031-5035.

Il lavoro, pubblicato su una rivista di buon impatto (Q2) riguarda la modificazione strutturale di inibitori peptidici dell'enzima cruzaina al fine di modulare la porzione reattiva in grado di interagire con la cisteina catalitica dell'enzima. Il lavoro è originale e di grande interesse nel campo dello sviluppo di inibitori di cistein-proteasi di interesse farmaceutico.

4) De Vita, D., Angeli, A., Pandolfi, F., Bortolami, M., Costi, R., Di Santo, R., Suffredini, E.,

Ceruso, M., Del Prete, S., Capasso, C., Scipione, L., Supuran, C.T. (2017) J. Enz. Inhib. Med. Chem., 32, 798-804. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1) descrive la preparazione di derivati amidici e solfonamidici come inibitori selettivi dell'anidrasi carbonica del batterio Vibrio Cholerae. Il lavoro, originale, risulta di significativo impatto presentando nuovi potenti lead compounds.*

5) De Vita, D., Pandolfi, F., Cirilli, R., Scipione, L., Di Santo, R., Friggeri, L., Mori, M., Fiorucci, D., Maccari, G., Christopher, R.S.A., Zamperini, C., Pau, V., De Logu, A., Tortorella, S., Botta, M. (2016) Eur. J. Med. Chem. 121, 169-180. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), è originale e condotto con rigore metodologico. Vengono riportati derivati imidazolici come potenziali agenti antiprotozoari che vengono valutati in silico mediante studi di docking molecolare nella sterol 14 α -demetilasi ed in vitro su diversi protozoi patogeni per l'uomo.*

6) De Vita, D., Moraca, F., Zamperini, C., Pandolfi, F., Di Santo, R., Matheussen, A., Maes, L., Tortorella, S., Scipione L. (2016) Eur. J. Med. Chem. 113, 28-33. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1) descrive un approccio originale per la ricerca di nuovi hit/lead compounds nel campo dei farmaci antitubercolari al fine di sviluppare nuovi agenti contro le specie divenute resistenti. Librerie commerciali e in-house sono state valutate in silico sulla base di un farmacoforo ligand-based al fine di selezionare i composti testati sulla specie batterica.*

7) De Vita, D., Simonetti, G., Pandolfi, F., Costi, R., Di Santo, R., D'Auria, F.D., Scipione L. (2016) Bioorg. Med. Chem. Lett. 26, 5931-5935. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di medio livello (Q3), riporta la valutazione di nuovi potenziali agenti antifungini e descrive la sintesi di esteri ed ammidi dell'acido cinnamico come inibitori della formazione di biofilm indotta da Candida albicans. La ricerca è originale e condotta con rigore metodologico.*

8) Friggeri, L., Hargrove, T.Y., Rachakonda, G., Williams, A.D., Wawrzak, Z., Di Santo, R., De Vita, D., Waterman, M.R., Tortorella, S., Villalta, F., Lepesheva, G.I. (2014) J. Med. Chem. 57, 6704-6717. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), descrive la sintesi di derivati beta-fenil imidazolici come inibitori dell'enzima sterol 14 α -demetilasi, essenziale per la sopravvivenza del Tripanosoma Cruzi. Le strutture cristallografiche dei complessi dell'enzima con gli inibitori più significativi hanno permesso di caratterizzare la modalità di legame dei composti. Il lavoro appare di grande importanza per lo sviluppo di nuovi agenti antitripanosomi.*

9) De Vita, D., Friggeri, L., D'Auria, F.D., Pandolfi, F., Piccoli, F., Panella, S., Palamara, A.T., Simonetti, G., Scipione, L., Di Santo, R., Costi, R., Tortorella, S. (2014) Bioorg. Med. Chem. Lett. 24, 1502-1505. *Il lavoro, condotto in modo rigoroso, è pubblicato su una rivista di medio impatto (Q3). Viene descritta la valutazione della capacità di inibire la formazione di biofilm prodotto da Candida Albicans da parte dell'acido caffeico e di suoi derivati di nuova sintesi.*

10) Friggeri, L., Scipione, L., Costi, R., Kaiser, M., Moraca, F., Zamperini, C., Botta, B., Di Santo, R., De Vita, D., Brun, R., Tortorella, S. (2013) ACS Med. Chem. Lett. 4, 538-541. *Il lavoro, originale e pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), riporta la caratterizzazione delle proprietà antiprotozoarie di derivati azolici, di cui viene valutata l'efficacia contro i tripanosomi e la citotossicità.*

11) Mellini, P., Carafa, V., Di Rienzo, B., Rotili, D., De Vita, D., Cirilli, R., Gallinella, B., Provisiero, D.P., Di Maro, S., Novellino, E., Altucci, L., Mai, A. (2012) ChemMedChem, 7, 1905-1908. *Questa comunicazione pubblicata su una rivista di buon livello (Q2), riporta la sintesi di derivati del carprofene e la loro valutazione come inibitori di sirtuine e come inibitori della progressione del ciclo cellulare e induttori di apoptosi in linee cellulari tumorali. Il lavoro appare originale e condotto con rigore metodologico.*

12) De Vita, D., Scipione, L., Tortorella, S., Mellini, P., Di Rienzo, B., Simonetti, G., D'Auria, F.D., Panella, S., Cirilli, R., Di Santo, R., Palamara, A.T. (2012) Eur. J. Med.

Chem. 49, 334-342. *Questo lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), descrive la preparazione e la valutazione dell'attività antifungina di derivati imidazolici nei confronti di Candida albicans ad altre specie, ponendo attenzione agli aspetti stereochimici correlati con l'attività biologica. Il lavoro è condotto con rigore scientifico e descrive risultati rilevanti nel campo.*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La candidata DE VITA presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, 3 comunicazioni orali e 9 poster a congressi.

Valutazione sulla produzione complessiva

La candidata DE VITA presenta una produzione scientifica complessiva di 27 pubblicazioni per le quali vengono dichiarati i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 8$; Citazioni totali = 183; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 6,78; IF Totale (27 pubblicazioni) = 91,55. IF Medio: 3,39. Queste pubblicazioni sono congruenti con il settore scientifico-disciplinare e sono riportate su riviste a diffusione internazionale, molte delle quali di ottimo livello. Le ricerche della candidata appaiono originali, condotte con rigore metodologico e con continuità temporale. La candidata risulta autore di riferimento o primo nome in 7 su 12 delle pubblicazioni presentate. La candidata ha inoltre riportato i risultati della propria attività scientifica in 3 comunicazioni orali e 9 presentazioni poster a congressi. La valutazione complessiva della candidata, desumibile dai documenti prodotti, evidenzia un ottimo livello scientifico, coerente con il SSD per il quale è stata bandita la posizione e con le competenze specifiche richieste dal bando.

GIUDIZIO COLLEGIALE

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2008.
2. Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche conseguita presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2004.
3. Tutoraggio di chimica generale ed inorganica Facoltà di Ingegneria Università di Roma "La Sapienza", AA 2008/09.
4. Insegnamento a contratto di Chimica Generale ed Inorganica presso il Dipartimento di Scienze Ecologiche E Biologiche (DEB) dell'Università Tuscia di Viterbo, per il corso di Scienze Ambientali, l'AA 2012/2013.
5. Collaborazione Coordinata e Continuativa (CO.CO.CO.), presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 02/04/2008 al 02/04/2009.
6. CO.CO.CO. presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 01/09/2010 al 28/02/2011.
7. CO.CO.CO. presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 01/03/2011 al 31/08/2011.
8. Incarico di lavoro autonomo presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", Novembre 2011.
9. Incarico di lavoro autonomo presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 01/10/2012 al 31/10/2012.
10. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma "La Sapienza", dal 02/05/2013 al 31/05/2014.

11. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma dal 01/06/2014 al 31/05/2015.
12. Borsa PostDoc presso l'Istituto di Chimica di Sao Carlos dell'Università di San Paolo (Brasile) dal 01/03/2016 al 30/04/2018.
13. 3 Comunicazioni orali e 9 poster a Congressi.
14. Lettera di Presentazione del Prof. Carlos Montanari.

Valutazione dei titoli

La candidata DE VITA ha conseguito la Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" nel 2004, e il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche presso lo stesso Ateneo, nel 2008, difendendo una tesi dal titolo: Derivati della 4-ammino piridina come potenziali inibitori delle colinesterasi, della quale non è stato possibile valutare la consistenza per mancanza del manoscritto. Ha svolto attività didattica come tutor nell'AA 2009/10 ed ha avuto un incarico come docente a Contratto di Scienze Ambientali presso il Dpt DEB dell'Università Tuscia di Viterbo, nell'AA 2012/2013. Le attività svolte durante i vari contratti CoCoCo, incarichi di lavoro autonomo e assegni di ricerca sono inerenti il SSD oggetto del presente concorso e congruenti con le tematiche del bando. La Commissione, dall'analisi dei titoli prodotti dalla candidata, mette in luce un profilo curriculare di ottimo livello. La candidata ha avuto continuità temporale sia nell'attività di ricerca svolta, congruente con il SSD oggetto del concorso, che nell'attività didattica.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

- 1) Cianni, L., Sartori, G., Rosini, F., De Vita, D., Pires, G., Lopes, B.R., Leitao, A., Burtoloso, A.C.B., Montanari, C.A. (2018) *Bioorg. Chem.* 79, 285-292. *Il lavoro descrive la sintesi di una serie di composti a struttura dipeptidica che risultano in grado di inibire la cruzaina. Sono effettuati studi in silico per valutare l'interazione con il residuo della Serina 61 dell'enzima e vengono riportati studi di cinetica e termodinamica. Il lavoro è rilevante nel campo dei potenziali agenti antitripanosomiaci, originale e pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 Chemistry, Organic).*
- 2) Saccoliti, F., Madia, V.N., Tudino, V., De Leo, A., Pescatori, L., Messori, A., De Vita, D., Scipione, L., Brun, R., Kaiser, M., Maser, P., Calvet, C.M., Jennings, G. K., Podust, L.M., Costi, R., Di Santo, R. (2018) *Eur. J. Med. Chem.* 156, 53-60. *Nel lavoro sono descritti alcuni agenti antifungini azolici che sono riposizionati nel campo dei composti ad azione antiprotozoaria. Tali composti sono valutati anche in vivo in modello di infezione da tripanosoma. Il lavoro è ben strutturato e molto rilevante nel settore dei farmaci antitripanosomiaci. E' pubblicato in una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 3) Silva, D.G., Ribeiro, J.F.R., De Vita, D., Cianni, L., Franco, C.H., Freitas-Junior, L.H., Moraes, C.B., Rocha, J.R., Burtoloso, A.C.B., Kenny, P.W., Leitao, A., Montanari, C.A. (2017) *Bioorg. and Med. Chem. Lett.* 27, 5031-5035. *La pubblicazione riguarda lo studio della modifica di un gruppo funzionale nitrile, tipico di alcuni peptidi che inibiscono la cruzaina. Viene proposta una trasformazione del nitrile che è molto importante per l'inibizione dell'enzima, in altri raggruppamenti molecolari. La pubblicazione è rilevante nell'ambito della ricerca su nuovi composti attivo contro i protozoi. Lo studio è condotto con metodologia rigorosa e pubblicato su una rivista di buon impatto (Q2).*
- 4) De Vita, D., Angeli, A., Pandolfi, F., Bortolami, M., Costi, R., Di Santo, R., Suffredini, E., Ceruso, M., Del Prete, S., Capasso, C., Scipione, L., Supuran, C.T. (2017) *J. Enz. Inhib. Med. Chem.* 32, 798-804. *Il lavoro riporta la scoperta di nuove ammidi e solfonammidi come inibitori dell'anidrasi carbonica del Vibrio Cholerae. Il lavoro propone un target alternativo per combattere il vibrione e che può essere potenzialmente ampliato anche ad altri tipi di batteri. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1) ed è condotto con rigore*

metodologico.

5) De Vita, D., Pandolfi, F., Cirilli, R., Scipione, L., Di Santo, R., Friggeri, L., Mori, M., Fiorucci, D., Maccari, G., Christopher, R.S.A., Zamperini, C., Pau, V., De Logu, A., Tortorella, S., Botta, M. (2016) Eur. J. Med. Chem. 121, 169-180. *In lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1) riporta uno screening di un set di derivati azolici nei confronti di protozoi patologici. E' riportato inoltre uno studio di docking molecolare per definire l'interazione tra tali inibitori e il target molecolare. Lo studio è condotto in modo rigoroso e propone un interessante avanzamento nel campo dei composti antiprotozoari.*

6) De Vita, D., Moraca, F., Zamperini, C., Pandolfi, F., Di Santo, R., Matheussen, A., Maes, L., Tortorella, S., Scipione L. (2016) Eur. J. Med. Chem. 113, 28-33. *Il lavoro descrive l'individuazione di composti attivi nei confronti del Mycobacterium Tuberculosis mediante ligand based approach. Sono state selezionate molecole appartenenti a due banche dati pubbliche e da una library in-house. Il lavoro ha notevole rilevanza nell'ambito dei composti che possono essere utili a combattere la tubercolosi, è condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

7) De Vita, D., Simonetti, G., Pandolfi, F., Costi, R., Di Santo, R., D'Auria, F.D., Scipione L. (2016) Bioorg. Med. Chem. Lett. 26, 5931-5935. *Il lavoro descrive la sintesi di alcuni esteri e ammidi cinnamoiliche e la loro attività nei confronti del biofilm in formazione di Candida Albicans. Il lavoro è pubblicato su una rivista di medio livello (Q3), è ben condotto e risulta importante per l'emergente problema della formazione di biofilm fungini.*

8) Friggeri, L., Hargrove, T.Y., Rachakonda, G., Williams, A.D., Wawrzak, Z., Di Santo, R., De Vita, D., Waterman, M.R., Tortorella, S., Villalta, F., Lepesheva, G.I. (2014) J. Med. Chem. 57, 6704-6717. *Il lavoro riporta nuovi derivati β -fenilimidazolici che risultano potenti agenti antiprotozoari. Viene descritta la progettazione, la sintesi e studi strutturali che delineano l'interazione di tali composto con il target CYP51. Questi studi gettano le basi per una futura progettazione razionale di nuovi agenti anti-T.cruzi. Questo lavoro trova la sua collocazione editoriale in una rivista di ottimo livello (Q1) ed è molto rilevante nell'ambito della ricerca su composti attivi nei confronti dei protozoi, e in particolare T. cruzi.*

9) De Vita, D., Friggeri, L., D'Auria, F.D., Pandolfi, F., Piccoli, F., Panella, S., Palamara, A.T., Simonetti, G., Scipione, L., Di Santo, R., Costi, R., Tortorella, S. (2014) Bioorg. and Med. Chem. Lett. 24, 1502-1505. *Il lavoro, condotto con rigore metodologico, descrive l'attività inibitrice dell'acido caffeico e di alcuni suoi derivati esterei nei confronti del biofilm fungino in formazione di Candida albicans. Il lavoro è pubblicato su una rivista di medio livello (Q3).*

10) Friggeri, L., Scipione, L., Costi, R., Kaiser, M., Moraca, F., Zamperini, C., Botta, B., Di Santo, R., De Vita, D., Brun, R., Tortorella, S. (2013) ACS Med. Chem. Lett. 4, 538-541. *Il lavoro descrive la sintesi e l'attività antiprotozoaria di una serie di azoli e amminopirimidine che risultano attive nei confronti di T. cruzi a concentrazione nanomolare. Il lavoro è ben concepito ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

11) Mellini, P., Carafa, V., Di Rienzo, B., Rotili, D., De Vita, D., Cirilli, R., Gallinella, B., Provisiero, D.P., Di Maro, S., Novellino, E., Altucci, L., Mai, A. (2012) ChemMedChem, 7, 1905-1908. *Il lavoro, svolto con rigore metodologico, descrive la sintesi di derivati del carprofene che risultano buoni inibitori della sirtuina. Se ne riportano sia gli studi di inibizione enzimatica che lo studio dell'effetto sulla cellula. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2).*

12) De Vita, D., Scipione, L., Tortorella, S., Mellini, P., Di Rienzo, B., Simonetti, G., D'Auria, F.D., Panella, S., Cirilli, R., Di Santo, R., Palamara, A.T. (2012) Eur. J. Med. Chem. 49, 334-342. *In questo lavoro sono riportati alcuni esteri aromatici e carbammati a struttura imidazolifenil etanolica che mostrano importante azione antifungina. Il lavoro è condotto con buon rigore metodologico, e i composti che presentano un centro*

stereogenico vengono cromatografati su colonna a fase fissa chirale in modo da ottenere i singoli enantiomeri. Questo permette di determinare l'eutomero della coppia. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1) ed è rilevante nel campo dei farmaci antifungini.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La candidata DE VITA presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, 3 comunicazioni orali e 9 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

La candidata DE VITA presenta pubblicazioni che hanno buona rilevanza considerando il panorama scientifico internazionale. Esse sono originali, innovative e in esse si denota che le ricerche sono state condotte con rigore metodologico. La produzione globalmente è quantificabile in 27 pubblicazioni su tematiche congruenti con quelle del SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. Per le 27 pubblicazioni la candidata dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 8$; Citazioni totali = 183; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 6,78; IF Totale (27 pubblicazioni) = 91,55. IF Medio: 3,39. La produzione scientifica è continua nel tempo, riportata su riviste a diffusione internazionale dotate prevalentemente di ottima collocazione editoriale e diffusione all'interno della comunità scientifica, ed è da considerare globalmente ottima. L'apporto individuale nei lavori in collaborazione è facilmente enucleabile in 7 sulle 12 pubblicazioni presentate, ove la candidata è autore di riferimento o primo nome. Nelle rimanenti, la Commissione ritiene che vi siano evidenti elementi di giudizio per individuare il suo apporto alla progettazione e sintesi, anche tenuto conto dell'attività scientifica globale sviluppata dalla candidata stessa. La produzione scientifica è stata divulgata mediante 3 Comunicazioni orali e 9 presentazioni poster a Congressi. Si conclude pertanto che la candidata ha raggiunto un livello scientifico molto buono che la pone in posizione idonea a ricoprire posizioni di rilievo nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08, con particolare riferimento a quelle richieste dal bando.

CANDIDATO: MADIA VALENTINA NOEMI

COMMISSARIO 1

Prof. Roberto Di Santo

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze della Vita presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2017.
2. Laurea in Farmacia presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2013.
3. Attività seminariale e di assistenza didattica per il corso di Analisi dei Medicinali II 2013/14 presso l'Università di Roma "La Sapienza".
4. Attività seminariale e di assistenza didattica per il corso di Chimica Farmaceutica e Tossicologica II 2013/2018, presso l'Università di Roma "La Sapienza".
5. Attività seminariale e di assistenza didattica per il corso di Ricerca e Sviluppo del Farmaco e Documentazione Scientifica, 2016/2018 presso l'Università di Roma "La Sapienza".
6. Tutoraggio per il corso di Stechiometria presso l'Università di Roma "La Sapienza" dal 03/05/2016 al 21/06/2016.
7. Assegno di ricerca dal titolo "Progettazione e sintesi di nuovi derivati eterociclici come agenti anti-HIV-1." SSD CHIM/08, presso il Dipartimento di Chimica e

tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01/02/2018 ad oggi.

8. Domanda di Brevetto 2017, EP 17163015.5.
9. 3 comunicazioni orali e 5 poster a congressi; Membro del Comitato Organizzatore di 1 Meeting.

Valutazione dei titoli

La candidata MADIA ha conseguito la Laurea in Farmacia nel 2013 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" e nel 2017 il Dottorato di Ricerca in Scienze della Vita presso il medesimo Ateneo difendendo una tesi dal titolo: Pyrrolyl Derivatives as Novel anti-HIV-1 Agents. Ha svolto attività didattica mediante seminari e assistenza didattica per i corsi di Analisi dei Medicinali II 2013/14, Chimica Farmaceutica e Tossicologica II 2013/2018, Ricerca e Sviluppo del Farmaco e Documentazione Scientifica, 2016/2018 presso l'Università di Roma "La Sapienza". Inoltre ha avuto un contratto per il tutoraggio per il corso di Stechiometria presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" nel 2016. La candidata ha avuto un assegno di ricerca dal titolo "Progettazione e sintesi di nuovi derivati eterociclici come agenti anti-HIV-1", SSD CHIM/08, presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" a partire dal 01/02/2018 e attualmente in vigore. E' tra gli inventori di una domanda di brevetto internazionale dal titolo 2-(4-(4-(Bromo-Methoxybenzamido)Benzylamino)Phenyl)Benzazole Derivatives and Their use as anti-heparanase", 2017, EP 17163015.5. Ha partecipato come membro del Comitato Organizzatore di 1 Meeting. L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata mette in luce un profilo curriculare di discreto livello, sia per quanto riguarda la continuità temporale dell'attività di ricerca svolta, che è congruente con il SSD oggetto del concorso e con linee di ricerca indicate nel bando, che per l'attività didattica che le è stata affidata.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

1. R. Costi, M. Métifiot, S. Chung, G. Cuzzucoli Crucitti, K. Maddali, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, L. Scipione, S. Tortorella, F. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. Le Grice, A. Corona, Y. Pommier, C. Marchand, R. Di Santo. J. Med. Chem. 2014, 57, 3223-3234. *La pubblicazione descrive la progettazione e sintesi di composti chinolonil dichetoacidi caratterizzati da un sostituente amminico come inibitori dell'integrasi di HIV-1. I composti sono ben caratterizzati sia da un punto di vista chimico che delle proprietà farmacologiche. Tali composti infatti sono anche studiati per valutare l'interazione con un altro target virale, la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa dell'HIV-1. Il lavoro è molto ben condotto ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
2. G. Cuzzucoli Crucitti, M. Metifiot, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. Esposito, A. Corona, M. Cadeddu, C. Marchand, Y. Pommier, E. Tramontano, R. Costi, R. Di Santo. J. Med. Chem. 2015, 58, 1915-1928. *Nella pubblicazione in oggetto è presentato uno studio SAR su composti pirrolil dichetoacidi che risultano inibitori duali dell'integrasi e della ribonucleasi H di HIV-1. I composti mostrano anche un'ottima attività in cellula infettata dal virus. Tale studio è molto rilevante soprattutto per l'aspetto di novità dell'approccio multi-target nel campo dell'HIV-1. E' condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1).*
3. L. Pescatori, M. Metifiot, S. Chung, T. Masaoka, G. Cuzzucoli Crucitti, A. Messori, G. Pupo, V. N. Madia, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, S. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. Le Grice, Y. Pommier, C. Marchand, R. Costi, R. Di Santo. J. Med. Chem. 2015, 58, 4610-4623. J. Med. Chem. 2015, 58(11), 4610-4623. *Studio SAR su composti chinolinonil dichetoacidi nel quale sono definiti i requisiti strutturali per*

indirizzare l'azione contro l'enzima integrasi di HIV, anziché contro la funzione ribonucleasica della trascrittasi inversa. Il lavoro è ben condotto e realizzato e è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).

4. G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, S. Di Leva, S. Cosconati, E. Novellino, Z. Debyser, F. Christ, R. Costi, R. Di Santo. Eur. J. Med. Chem. 2015, 101, 288-294. Eur. J. Med. Chem. 2015, 101, 288-294. *Il lavoro descrive la scoperta di una classe di composti a struttura N-aryl-naftilamminica che vengono riposizionati come composti ad attività inibitrice nei confronti dell'interazione proteina-proteina integrasi dell'HIV-1/LEDGF umana. Il lavoro è molto originale e ben condotto. E' stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

5. A. Corona, F. S. Di Leva, G. Rigogliuso, L. Pescatori, V. N. Madia, F. Subra, O. Delelis, F. Esposito, M. Cadeddu, R. Costi, S. Cosconati, E. Novellino, R. Di Santo, E. Tramontano. Antiviral Res. 2016, 134, 236-243. *Il lavoro descrive a fondo le interazioni tra alcuni composti a struttura pirrolidicheto acida e l'enzima integrasi di HIV-1. E' riportato un interessante confronto con l'interazione che tali composti hanno anche nei confronti della ribonucleasi H. E' molto interessante nel campo dei composti anti-HIV perché definisce le caratteristiche strutturali di un composto per indirizzare l'attività verso uno dei due target rispetto all'altro. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1- Pharmacy).*

6. F. Saccoliti, G. Angiulli, G. Pupo, L. Pescatori, V. N. Madia, A. Messori, G. Colotti, A. Fiorillo, L. Scipione, M. Gramiccia, T. Di Muccio, R. Di Santo, R. Costi and A. Ilari. J. Enzyme Inhib. Med. Chem. 2017, 32, 304-310. *Il lavoro descrive la scoperta di un nuovo inibitore della tripanotione reductasi di Leishmania infantum. Sono riportati sia studi strutturalistici che la caratterizzazione biochimica. Lo studio è rilevante dal momento che riporta un nuovo inibitore di questo target che si propone come importante punto di partenza per lo sviluppo di una nuova classe di composti antiprotozoari. Il lavoro denota grande rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

7. V. N. Madia, R. Benedetti, L. Barreca, L. Ngo, L. Pescatori, A. Messori, G. Pupo, F. Saccoliti, S. Valente, A. Mai, L. Scipione, Y. G. Zeng, C. Tintori, M. Botta, V. Cecchetti, L. Altucci, R. Di Santo, R. Costi. ChemMedChem 2017, 12, 1359-1368. *Il lavoro descrive le SAR di una serie di composti a struttura base cinnamoilica in grado di inibire un target epigenetico: l'istone acetil transferasi p300. Lo studio è condotto con rigore metodologico e porta interessanti avanzamenti in questo settore di indagine. E' pubblicato su una rivista di buon livello (Q2)*

8. F. Saccoliti, V. N. Madia, V. Tudino, A. De Leo, L. Pescatori, A. Messori, D. De Vita, L. Scipione, R. Brun, M. Kaiser, P. Mäser, C. M. Calvet, G. K. Jennings, L. M. Podust, R. Costi, R. Di Santo. Eur. J. Med. Chem. 2018, 156, 53-60. Eur. J. Med. Chem. 2018, 156, 53-60. *Il lavoro descrive il riposizionamento di alcuni agenti antifungini azolici nel campo dei composti ad azione antiprotozoaria e ne viene valutata anche l'attività in vivo. Il lavoro è ben strutturato e molto rilevante nel settore farmaci antitripanosomiaci. E' pubblicato in una rivista di ottimo livello (Q1).*

TESI DOTTORATO

Titolo: Pyrrolyl Derivatives as Novel anti-HIV-1 Agents. La tesi presentata dalla candidata è stata conseguita in una Scuola di Dottorato multidisciplinare e descrive la progettazione e sintesi di derivati pirrolici come potenti agenti anti-HIV attivi contro target virali quali l'integrasi e la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa. La tesi è originale sviluppata in modo eccellente, con rigore scientifico e metodologico e tratta argomenti innovativi nell'ambito dei composti ad attività antiretrovirale.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La candidata MADIA presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 8 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, tesi di Dottorato, 1 domanda di brevetto, 3 comunicazioni orali e 5 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

La candidata MADIA presenta pubblicazioni originali, innovative, nelle quali si denota rigore metodologico e di ottima rilevanza considerando il panorama scientifico internazionale. La produzione è congruente con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura e con le linee di ricerca indicate nel bando. La produzione scientifica è globalmente ottima in relazione al breve periodo temporale di attività, continua nel tempo e riportata su riviste a diffusione internazionale dotate di ottima collocazione editoriale e diffusione all'interno della comunità scientifica. La candidata è anche coinventore di una domanda di brevetto internazionale. La produzione globalmente è quantificabile in 8 pubblicazioni, 1 tesi di dottorato, 1 domanda di brevetto. Per le 8 pubblicazioni la candidata dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 5$; Citazioni totali = 81; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 10,125; IF Totale (8 pubblicazioni) = 36,261. Inoltre IF Totale (8 pubblicazioni + 1 brevetto) = 36,261 + 1 IF medio del settore; IF Medio: 4,533. L'apporto individuale è facilmente enucleabile in un lavoro, nel quale la candidata è primo autore. La candidata ha partecipato a due finanziamenti di Ateneo (Università di Roma "La Sapienza" Anno 2016 e Anno 2017) ed ha presentato i propri risultati scientifici a Congressi, in 3 Comunicazioni orali e 5 presentazioni poster oltre ad essere stata membro del Comitato organizzatore di un Meeting. La candidata da un punto di vista qualitativo ha raggiunto un buon livello scientifico, da un punto di vista quantitativo la produzione è discreta. Si denotano comunque presupposti buoni per lo sviluppo di una qualità scientifica di alto livello.

COMMISSARIO 2

Prof. Pietro Campiglia

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze della Vita presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2017.
2. Laurea in Farmacia presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2013.
3. Attività seminariale e di assistenza didattica per il corso di Analisi dei Medicinali II 2013/14 presso l'Università di Roma "La Sapienza".
4. Attività seminariale e di assistenza didattica per il corso di Chimica Farmaceutica e Tossicologica II 2013/2018, presso l'Università di Roma "La Sapienza".
5. Attività seminariale e di assistenza didattica per il corso di Ricerca e Sviluppo del Farmaco e Documentazione Scientifica, 2016/2018 presso l'Università di Roma "La Sapienza".
6. Tutoraggio per il corso di Stechiometria presso l'Università di Roma "La Sapienza" dal 03/05/2016 al 21/06/2016.
7. Assegno di ricerca dal titolo "progettazione e sintesi di nuovi derivati eterociclici come agenti anti-HIV-1. SSD CHIM/08, presso il Dipartimento di Chimica e tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01/02/2018 ad oggi.
8. Domanda di Brevetto 2017, EP 17163015.5.
9. 3 comunicazioni orali e 5 poster a congressi; Membro del Comitato Organizzatore di 1 Meeting.

Valutazione sui titoli

Dottorato di Ricerca in Scienze della Vita conseguito presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" nel 2017, trattando il design e la sintesi nuovi inibitori del virus HIV-1, argomento in linea con il SSD oggetto del presente concorso. Fa seguito al dottorato di ricerca un assegno di ricerca sulla medesima tematica ed una serie di attività didattiche, per lo più di tipo seminariale e di assistenza, congruenti con il SSD oggetto del presente concorso e con le tematiche del bando del presente concorso. A questo si aggiunge una domanda di brevetto. La candidata risulta titolare di 3 comunicazioni orali e 5 poster a congressi, 1 partecipazione come membro del Comitato Organizzatore di Meeting. Il giudizio in merito ai titoli presentati è buono.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. R. Costi, M. Métifiot, S. Chung, G. Cuzzucoli Crucitti, K. Maddali, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, L. Scipione, S. Tortorella, F. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. Le Grice, A. Corona, Y. Pommier, C. Marchand, R. Di Santo. *J. Med. Chem.* 2014, 57, 3223-3234. *La pubblicazione descrive la progettazione e sintesi di composti chinolonil dichetoacidi attivi come inibitori dell'integrasi di HIV-1. Il lavoro è molto ben condotto ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
2. G. Cuzzucoli Crucitti, M. Metifiot, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. Esposito, A. Corona, M. Cadeddu, C. Marchand, Y. Pommier, E. Tramontano, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.* 2015, 58, 1915-1928. *Il lavoro è incentrato su uno studio di relazione struttura-attività di derivati pirrolil dichetoacidi come inibitori duali dell'integrasi e della ribonucleasi H di HIV-1. La caratterizzazione farmacologica comprende studi in cellula, nei quali sono evidenziate ottime attività inibitorie dei composti più rappresentativi. Il lavoro è caratterizzato da elevatissima rilevanza ed assoluta originalità. E' condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su rivista di primissimo livello (Q1).*
3. L. Pescatori, M. Metifiot, S. Chung, T. Masaoka, G. Cuzzucoli Crucitti, A. Messori, G. Pupo, V. N. Madia, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, S. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. Le Grice, Y. Pommier, C. Marchand, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.* 2015, 58, 4610-4623. *In questo studio, complementare al precedente, sono descritti i requisiti strutturali fondamentali dei derivati chinolinonil dichetoacidi per un'azione inibitoria selettiva verso l'enzima integrasi di HIV. Il lavoro è ben condotto e realizzato e è pubblicato su una rivista di primissimo livello in ambito chimico-farmaceutico (Q1).*
4. G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, S. Di Leva, S. Cosconati, E. Novellino, Z. Debyser, F. Christ, R. Costi, R. Di Santo. *Eur. J. Med. Chem.* 2015, 101, 288-294. *Il lavoro descrive l'identificazione di derivati a struttura N-aril-naftilamminica derivanti da un'operazione di drug-repositioning ed attivi come inibitori dell'interazione proteina-proteina tra integrasi dell'HIV-1 e LEDGF umana. Il lavoro è molto originale e ben condotto. E' stato pubblicato su una rivista di altissimo livello (Q1).*
5. A. Corona, F. S. Di Leva, G. Rigogliuso, L. Pescatori, V. N. Madia, F. Subra, O. Delelis, F. Esposito, M. Cadeddu, R. Costi, S. Cosconati, E. Novellino, R. Di Santo, E. Tramontano. *Antiviral Res.* 2016, 134, 236-243. *Il lavoro è basato sulle interazioni molecolari intercorrenti tra composti a struttura pirrolidicheto acida e l'integrasi di HIV-1 confrontate con le interazioni fondamentali intercorrenti con la ribonucleasi H dello stesso virus. E' un lavoro condotto con notevole rigore metodologico contenente risultati rilevanti dal punto di vista scientifico. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1- Pharmacy).*
6. F. Saccoliti, G. Angiulli, G. Pupo, L. Pescatori, V. N. Madia, A. Messori, G. Colotti, A. Fiorillo, L. Scipione, M. Gramiccia, T. Di Muccio, R. Di Santo, R. Costi and A. Ilari. *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* 2017, 32, 304-310. *Il lavoro descrive la scoperta di un nuovo*

diaryl solfuro inibitore della tripanotione reduttasi del parassita Leishmania infantum. Lo studio è basato sulla determinazione delle caratteristiche strutturali di interazione con il target e conseguente valutazione farmacologica. Il lavoro denota grande rigore metodologico, rilevanza scientifica ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).

7. V. N. Madia, R. Benedetti, L. Barreca, L. Ngo, L. Pescatori, A. Messori, G. Pupo, F. Saccoliti, S. Valente, A. Mai, L. Scipione, Y. G. Zeng, C. Tintori, M. Botta, V. Cecchetti, L. Altucci, R. Di Santo, R. Costi. ChemMedChem 2017, 12, 1359-1368. *Il lavoro si basa sulla definizione delle relazioni struttura-attività di una libreria di composti a struttura cinnamoilica in grado di inibire l'istone acetil transferasi p300. Lo studio è condotto con rigore metodologico e reca interessanti spunti ed avanzamenti in questo ambito scientifico. E' pubblicato su una rivista di buon livello (Q2).*

8. F. Saccoliti, V. N. Madia, V. Tudino, A. De Leo, L. Pescatori, A. Messori, D. De Vita, L. Scipione, R. Brun, M. Kaiser, P. Mäser, C. M. Calvet, G. K. Jennings, L. M. Podust, R. Costi, R. Di Santo. Eur. J. Med. Chem. 2018, 156, 53-60. *Il lavoro descrive un processo di drug-repositioning a carico di agenti antifungini azolici come derivati ad attività antiprotozoaria. Il lavoro è ben strutturato e molto rilevante nel settore degli antiinfettivi ed è pubblicato in una rivista di ottimo livello (Q1).*

TESI DOTTORATO

Titolo: Pyrrolyl Derivatives as Novel anti-HIV-1 Agents. La tesi presentata dalla candidata descrive la progettazione e sintesi di derivati pirrolici caratterizzati da una porzione dichetoacida che agiscono contro target del virus dell'-HIV-1, quali l'integrasi e la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa. La tesi è originale sviluppata in modo eccellente, con rigore scientifico e metodologico e tratta argomenti innovativi nell'ambito dei composti ad attività antiretrovirale. è stata conseguita in una Scuola di Dottorato multidisciplinare e

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La candidata MADIA presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 8 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, tesi di Dottorato, 1 domanda di brevetto, 3 comunicazioni orali e 5 poster a congressi.

Valutazione sulla produzione complessiva

La candidata MADIA ha una produzione scientifica continua nell'arco temporale considerato ed è caratterizzata fortemente verso il design, la sintesi e la caratterizzazione farmacologica di molecole antivirali agenti sul virus HIV-1. Le pubblicazioni presentate evidenziano che la candidata ha maturato buona esperienza e competenze in ambiti attinenti alle tematiche richieste nel bando del presente concorso. Presenta pubblicazioni originali, innovative, nelle quali si denota rigore metodologico e di ottima rilevanza considerando il panorama scientifico internazionale. La produzione è congruente con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. La candidata è anche coinventore di una domanda di brevetto internazionale. La produzione globalmente è quantificabile in 8 pubblicazioni, 1 tesi di dottorato, 1 domanda di brevetto. Per le 8 pubblicazioni la candidata dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 5$; Citazioni totali = 81; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 10,125; IF Totale (8 pubblicazioni) = 36,261. Inoltre IF Totale (8 pubblicazioni + 1 brevetto) = 36,261 + 1 IF medio del settore; IF Medio: 4,533. L'apporto individuale è facilmente enucleabile in un lavoro nel quale la candidata è primo autore. La candidata ha inoltre presentato i propri risultati scientifici in 3 Comunicazioni orali e 5 presentazioni poster a Congressi. E' stata membro del Comitato organizzatore di un Meeting. Dal punto di vista qualitativo la produzione scientifica è

importante nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08, con particolare riferimento a quelle richieste dal bando. Da un punto di vista quantitativo la produzione è discreta. La completa maturità scientifica sembra non essere stata ancora raggiunta, ma i presupposti sono assolutamente rimarchevoli.

COMMISSARIO 3

Prof.ssa Silvia Rivara

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze della Vita presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2017.
2. Laurea in Farmacia presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2013.
3. Attività seminariale e di assistenza didattica per il corso di Analisi dei Medicinali II 2013/14 presso l'Università di Roma "La Sapienza".
4. Attività seminariale e di assistenza didattica per il corso di Chimica Farmaceutica e Tossicologica II 2013/2018, presso l'Università di Roma "La Sapienza".
5. Attività seminariale e di assistenza didattica per il corso di Ricerca e Sviluppo del Farmaco e Documentazione Scientifica, 2016/2018 presso l'Università di Roma "La Sapienza".
6. Tutoraggio per il corso di Stechiometria presso l'Università di Roma "La Sapienza" dal 03/05/2016 al 21/06/2016.
7. Assegno di ricerca dal titolo "progettazione e sintesi di nuovi derivati eterociclici come agenti anti-HIV-1. SSD CHIM/08, presso il Dipartimento di Chimica e tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01/02/2018 ad oggi.
8. Domanda di Brevetto 2017, EP 17163015.5.
9. 3 comunicazioni orali e 5 poster a congressi; Membro del Comitato Organizzatore di 1 Meeting.

Valutazione sui titoli

La candidata MADIA si è laureata nel 2013 in Farmacia presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" e nello stesso ateneo ha conseguito il Dottorato di ricerca nel 2017. Nell'ambito del dottorato si è occupata dello sviluppo di nuovi agenti contro le infezioni da HIV-1. Ha svolto una notevole attività didattica seminariale, di tutoraggio e di assistenza didattica per diversi corsi di studio negli anni 2013-2018. Da febbraio 2018 risulta titolare di un assegno di ricerca per lo sviluppo di nuovi derivati eterociclici come agenti anti-HIV-1 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".

I titoli presentati e l'esperienza scientifica della candidata sono di discreto livello ed appaiono congruenti con le tematiche del SSD del concorso e con le linee di ricerca indicate dal bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. R. Costi, M. Métifiot, S. Chung, G. Cuzzucoli Crucitti, K. Maddali, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, L. Scipione, S. Tortorella, F. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. Le Grice, A. Corona, Y. Pommier, C. Marchand, R. Di Santo. *J. Med. Chem.* 2014, 57, 3223-3234. *Il lavoro appare originale, completo e condotto rigorosamente. Viene presentata la sintesi e la caratterizzazione biologica di nuovi derivati dichetoacidi come inibitori dell'enzima integrasi e dell'attività RNAsica dell'enzima trascrittasi inversa del virus HIV, nell'ambito di un approccio multi-target. Studi di modellistica molecolare permettono la razionalizzazione delle relazioni struttura-attività*

osservate per i composti di nuova sintesi. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).

2. G. Cuzzucoli Crucitti, M. Metifiot, L. Pescatori, A. Messore, V. N. Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. Esposito, A. Corona, M. Cadeddu, C. Marchand, Y. Pommier, E. Tramontano, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.* 2015, 58, 1915-1928. *Lo studio descritto su questo articolo appare condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1). Il lavoro riguarda la sintesi di inibitori duali dell'attività integrasica e RNAsica del virus HIV, come efficace strategia per lo sviluppo di nuovi agenti antiretrovirali.*

3. L. Pescatori, M. Metifiot, S. Chung, T. Masaoka, G. Cuzzucoli Crucitti, A. Messore, G. Pupo, V. N. Madia, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, S. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. Le Grice, Y. Pommier, C. Marchand, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.* 2015, 58, 4610-4623. *Questo lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1) riporta la preparazione di derivati chinolinilil dichetoacidi testati come inibitori dell'attività di strand transfer dell'enzima integrasi, nell'ambito dello sviluppo di nuovi agenti antiretrovirali. Studi di modellistica molecolare razionalizzano la modalità di legame all'enzima e la selettività nei confronti di altri enzimi di HIV.*

4. G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messore, V. N. Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, S. Di Leva, S. Cosconati, E. Novellino, Z. Debyser, F. Christ, R. Costi, R. Di Santo. *Eur. J. Med. Chem.* 2015, 101, 288-294. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1) appare originale nell'ideazione e condotto rigorosamente. Viene riportata la scoperta e la sintesi di nuovi composti a struttura N-aril-naftilamminica come antivirali capaci di inibire l'interazione dell'enzima integrasi con il cofattore LEDGF.*

5. A. Corona, F. S. Di Leva, G. Rigogliuso, L. Pescatori, V. N. Madia, F. Subra, O. Delelis, F. Esposito, M. Cadeddu, R. Costi, S. Cosconati, E. Novellino, R. Di Santo, E. Tramontano. *Antiviral Res.* 2016, 134, 236-243. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1- Pharmacy), riporta l'indagine sulla modalità di legame di derivati pirrolil-dichetoacidi al sito attivo dell'enzima integrasi di HIV, condotta mediante studi di modellistica molecolare e di mutagenesi. Lo studio appare significativo soprattutto per le informazioni fornite in merito ai requisiti strutturali che permettono di differenziare l'attività inibitoria di questo tipo di composti sull'enzima integrasi o sull'attività RNAsica della trascrittasi inversa di HIV. Il lavoro appare originale e condotto in modo accurato.*

6. F. Saccoliti, G. Angiulli, G. Pupo, L. Pescatori, V. N. Madia, A. Messore, G. Colotti, A. Fiorillo, L. Scipione, M. Gramiccia, T. Di Muccio, R. Di Santo, R. Costi and A. Ilari. *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* 2017, 32, 304-310. *Questo originale lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), riporta la scoperta, mediante screening di una libreria in-house, di inibitori dell'enzima tripanotione reduttasi di Leishmania. Il lavoro appare particolarmente rilevante per la caratterizzazione molecolare dell'inibizione enzimatica ottenuta mediante analisi cristallografica.*

7. V. N. Madia, R. Benedetti, L. Barreca, L. Ngo, L. Pescatori, A. Messore, G. Pupo, F. Saccoliti, S. Valente, A. Mai, L. Scipione, Y. G. Zeng, C. Tintori, M. Botta, V. Cecchetti, L. Altucci, R. Di Santo, R. Costi. *ChemMedChem* 2017, 12, 1359-1368. *Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2) e riporta la sintesi, valutazione dell'attività biologica e studio di relazioni struttura-attività per una serie di derivati cinnamici inibitori dell'attività dell'enzima p300 istone acetil-transferasi. Il lavoro appare originale e riporta risultati rilevanti dal punto di vista scientifico.*

8. F. Saccoliti, V. N. Madia, V. Tudino, A. De Leo, L. Pescatori, A. Messore, D. De Vita, L. Scipione, R. Brun, M. Kaiser, P. Mäser, C. M. Calvet, G. K. Jennings, L. M. Podust, R. Costi, R. Di Santo. *Eur. J. Med. Chem.* 2018, 156, 53-60. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), descrive l'attività antiprotozoaria e le relazioni struttura-attività proprie di una classe di derivati azolici già noti per la loro attività antifungina. Il lavoro*

risulta particolarmente interessante per la scoperta della potente azione di alcuni derivati contro il T. cruzi e per la definizione del meccanismo d'azione.

TESI DOTTORATO

Titolo: Pyrrolyl Derivatives as Novel anti-HIV-1 Agents. La tesi tratta della progettazione e sintesi di farmaci antiretrovirali dual-target agenti come inibitori di integrasi e dell'attività ribonucleasica H dell'enzima trascrittasi inversa di HIV. La tesi è originale e presenta un approccio innovativo. L'attività di ricerca è stata condotta con rigore metodologico.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La candidata MADIA presenta alla valutazione una produzione scientifica complessiva pari a n. 8 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, tesi di Dottorato, 1 domanda di brevetto, 3 comunicazioni orali e 5 poster a congressi.

Valutazione sulla produzione complessiva

La candidata MADIA presenta una produzione scientifica originale, condotta con rigore metodologico ed orientata soprattutto verso lo studio di composti antiretrovirali e antiprotozoari. L'attività scientifica e la produzione complessiva sono congruenti con il SSD per cui è stata bandita questa procedura. I risultati delle ricerche sono stati pubblicati su riviste di ottima collocazione editoriale nel panorama internazionale. La produzione complessiva della candidata è di 8 pubblicazioni per la quale vengono dichiarati i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 5$; Citazioni totali = 81; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 10,125; IF Totale (8 pubblicazioni) = 36,261. Inoltre IF Totale (8 pubblicazioni + 1 brevetto) = 36,261 + 1 IF medio del settore; IF Medio: 4,533. L'apporto individuale della candidata nella produzione scientifica non è facilmente enucleabile poichè presenta un solo lavoro come primo autore. La candidata è inoltre co-inventrice in una domanda di brevetto internazionale e ha presentato i risultati della propria attività scientifica in 3 comunicazioni orali e 5 presentazioni poster a congressi. E' stata membro del comitato organizzatore di un meeting. Il livello scientifico della candidata appare buono, e discreta è la produzione scientifica da un punto di vista quantitativo e congruente con il SSD per il quale è bandita la procedura e con le specifiche indicazioni presenti nel bando. Sebbene la candidata non appaia avere ancora una piena maturità scientifica, si colgono ottimi presupposti per la sua futura realizzazione.

GIUDIZIO COLLEGIALE

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze della Vita presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2017.
2. Laurea in Farmacia presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2013.
3. Attività seminariale e di assistenza didattica per il corso di Analisi dei Medicinali II 2013/14 presso l'Università di Roma "La Sapienza".
4. Attività seminariale e di assistenza didattica per il corso di Chimica Farmaceutica e Tossicologica II 2013/2018, presso l'Università di Roma "La Sapienza".
5. Attività seminariale e di assistenza didattica per il corso di Ricerca e Sviluppo del Farmaco e Documentazione Scientifica, 2016/2018 presso l'Università di Roma "La Sapienza".
6. Tutoraggio per il corso di Stechiometria presso l'Università di Roma "La Sapienza" dal 03/05/2016 al 21/06/2016.
7. Assegno di ricerca dal titolo "progettazione e sintesi di nuovi derivati eterociclici come agenti anti-HIV-1. SSD CHIM/08, presso il Dipartimento di Chimica e

tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01/02/2018 ad oggi.

8. Domanda di Brevetto 2017, EP 17163015.5.
9. 3 comunicazioni orali e 5 poster a congressi; Membro del Comitato Organizzatore di 1 Meeting.

Valutazione dei titoli

La candidata MADIA ha conseguito la Laurea in Farmacia nel 2013 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" e nel 2017 il Dottorato di Ricerca in Scienze della Vita presso il medesimo Ateneo. Dal 2013 al 2018 ha svolto attività didattica inerente il SSD oggetto del presente bando. La candidata ha avuto un assegno di ricerca che è attualmente attivo, nello stesso SSD. E' tra gli inventori di una domanda di brevetto internazionale 2017, EP 17163015.5 ed ha partecipato come membro del Comitato Organizzatore di 1 Meeting. L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata mette in luce un profilo curriculare di discreto livello. Si evince la continuità temporale sia nell'attività di ricerca svolta, che è congruente con il SSD oggetto del concorso, che nell'attività didattica che le è stata affidata. L'esperienza scientifica maturata della candidata è congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. R. Costi, M. Métifiot, S. Chung, G. Cuzzucoli Crucitti, K. Maddali, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, L. Scipione, S. Tortorella, F. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. Le Grice, A. Corona, Y. Pommier, C. Marchand, R. Di Santo. *J. Med. Chem.* 2014, 57, 3223-3234. *La pubblicazione descrive composti chinolonil dichetoacidi caratterizzati da un sostituente amminico che sono progettati e sintetizzati come inibitori dell'integrasi di HIV-1. Viene riportato anche lo studio per determinare l'attività di tali composti nei confronti della funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa dell'HIV-1. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
2. G. Cuzzucoli Crucitti, M. Metifiot, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. Esposito, A. Corona, M. Cadeddu, C. Marchand, Y. Pommier, E. Tramontano, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.* 2015, 58, 1915-1928. *Nella pubblicazione sono presentati composti pirrolil dichetoacidi come inibitori duali dell'integrasi e della ribonucleasi H di HIV-1. I composti risultano anche attivi in cellula infettata dal virus. Lo studio SAR che è descritto è molto rilevante soprattutto per l'aspetto di novità dell'approccio multi-target nel campo dell'HIV-1. E' condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1).*
3. L. Pescatori, M. Metifiot, S. Chung, T. Masaoka, G. Cuzzucoli Crucitti, A. Messori, G. Pupo, V. N. Madia, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, S. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. Le Grice, Y. Pommier, C. Marchand, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.* 2015, 58, 4610-4623. *Lo studio riporta composti chinolinonil dichetoacidi che mostrano potente azione anti-integrasi di HIV-1. Le SAR descritte aiutano a definire i requisiti strutturali per indirizzare l'azione di tali composti selettivamente contro l'enzima integrasi di HIV, rispetto alla funzione ribonucleasica della trascrittasi inversa. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
4. G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, S. Di Leva, S. Cosconati, E. Novellino, Z. Debyser, F. Christ, R. Costi, R. Di Santo. *Eur. J. Med. Chem.* 2015, 101, 288-294. *Il lavoro descrive la scoperta di una classe di composti a struttura N-aril-naftilamminica che mostrano attività inibitrice nei confronti dell'interazione proteina-proteina che si instaura tra l'integrasi dell'HIV-1 e il fattore LEDGF della cellula ospite. Il lavoro è molto originale, ben condotto ed è stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

5. A. Corona, F. S. Di Leva, G. Rigogliuso, L. Pescatori, V. N. Madia, F. Subra, O. Delelis, F. Esposito, M. Cadeddu, R. Costi, S. Cosconati, E. Novellino, R. Di Santo, E. Tramontano. *Antiviral Res.* 2016, 134, 236-243. *Il lavoro descrive alcuni composti a struttura pirrolidicheto acida e ne studia le interazioni con l'enzima integrasi di HIV-1. Viene studiata anche l'interazione nei confronti della ribonucleasi H. I risultati dello studio sono molto interessanti nel campo dei composti anti-HIV perché portano a definire le caratteristiche strutturali dei composti di questa serie necessarie per indirizzare l'attività verso uno dei due target rispetto all'altro. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1-Pharmacy).*
6. F. Saccoliti, G. Angiulli, G. Pupo, L. Pescatori, V. N. Madia, A. Messori, G. Colotti, A. Fiorillo, L. Scipione, M. Gramiccia, T. Di Muccio, R. Di Santo, R. Costi and A. Ilari. *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* 2017, 32, 304-310. *Il lavoro riporta un nuovo inibitore della tripanotione reduttasi di Leishmania infantum a struttura diariltioeterea. Sono riportati sia studi strutturali basati su RX del cristallo enzima-inibitore, sia la caratterizzazione biochimica. Lo studio è rilevante dal momento che getta le basi per una progettazione razionale di nuovi composti ad azione antiprotozoaria che colpiscono un target innovativo. Il lavoro denota grande rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
7. V. N. Madia, R. Benedetti, L. Barreca, L. Ngo, L. Pescatori, A. Messori, G. Pupo, F. Saccoliti, S. Valente, A. Mai, L. Scipione, Y. G. Zeng, C. Tintori, M. Botta, V. Cecchetti, L. Altucci, R. Di Santo, R. Costi. *ChemMedChem* 2017, 12, 1359-1368. *E' presentato uno studio SAR di una serie di composti a struttura base cinnamoilica in grado di inibire l'istone acetil transferasi p300. Lo studio su tale target epigenetico è condotto con rigore metodologico e porta interessanti avanzamenti in questo settore di indagine. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q2)*
8. F. Saccoliti, V. N. Madia, V. Tudino, A. De Leo, L. Pescatori, A. Messori, D. De Vita, L. Scipione, R. Brun, M. Kaiser, P. Mäser, C. M. Calvet, G. K. Jennings, L. M. Podust, R. Costi, R. Di Santo. *Eur. J. Med. Chem.* 2018, 156, 53-60. *Il lavoro descrive il riposizionamento di alcuni agenti antifungini azolici nel campo dei composti ad azione antiprotozoaria e ne viene valutata anche l'attività in vivo su modelli murini di infezione acuta da T. cruzi. Il lavoro è ben strutturato e molto rilevante nel settore dei farmaci antitripanosomiaci. E' pubblicato in una rivista di ottimo livello (Q1).*

TESI DOTTORATO

Titolo: Pyrrolyl Derivatives as Novel anti-HIV-1 Agents. La tesi presentata dalla candidata descrive la progettazione e sintesi di derivati pirrolici come potenti agenti anti-HIV attivi contro target virali quali l'integrasi e la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa ed è stata conseguita in una Scuola di Dottorato multidisciplinare. La tesi è sviluppata in modo eccellente e con rigore scientifico e metodologico; è originale e tratta argomenti innovativi nell'ambito dei composti ad attività antiretrovirale.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La candidata MADIA presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 8 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, tesi di Dottorato, 1 domanda di brevetto, 3 comunicazioni orali e 5 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

La produzione scientifica della candidata MADIA è congruente con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. La candidata presenta pubblicazioni innovative e originali e nelle quali si denota rigore metodologico. I lavori appaiono rilevanti considerando il panorama scientifico internazionale. La produzione scientifica è globalmente ottima in

relazione al breve periodo temporale di attività. Essa è continua nel tempo e riportata su riviste a diffusione internazionale dotate di ottima collocazione editoriale e diffusione all'interno della comunità scientifica. La produzione è quantificabile in 8 pubblicazioni, 1 tesi di dottorato, 1 domanda di brevetto. Per le 8 pubblicazioni la candidata dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 5$; Citazioni totali = 81; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 10,125; IF Totale (8 pubblicazioni) = 36,261. Inoltre IF Totale (8 pubblicazioni + 1 brevetto) = 36,261 + 1 IF medio del settore; IF Medio: 4,533. L'apporto individuale è facilmente individuabile in un solo lavoro nel quale la candidata risulta primo autore. Comunque, tenuto conto anche dell'attività scientifica globale sviluppata dalla candidata stessa, la Commissione ritiene che vi siano evidenti elementi di giudizio per individuare il suo apporto alla progettazione e sintesi, anche nelle pubblicazioni dove non è in evidenza. La candidata ha presentato i propri risultati scientifici in 3 Comunicazioni orali e mediante 5 presentazioni poster a Congressi. E' stata membro del Comitato organizzatore di un Meeting e ha partecipato a due finanziamenti di Ateneo (Università di Roma "La Sapienza" Anno 2016 e Anno 2017). La candidata da un punto di vista qualitativo ha raggiunto un buon livello scientifico nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08, con particolare riferimento a quelle richieste dal bando. Da un punto di vista quantitativo la produzione è discreta e si può concludere che la candidata mostri tutti i presupposti per lo sviluppo di una carriera scientifica di alto livello, pur non avendo raggiunto al momento piena maturità.

CANDIDATO: MARAMAI SAMUELE

COMMISSARIO 1

Prof. Roberto Di Santo

TITOLI

1. DOTTORATO DI RICERCA in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università degli Studi di Siena nel 2012.
2. LAUREA in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2008 conseguita presso l'Università di Siena.
3. Tutor Didattico Facoltà di Farmacia presso l'Università di Siena 2011/12.
4. Tutor Didattico Facoltà di Farmacia presso l'Università di Siena 2012/13.
5. Master II livello in Drug Design and Synthesis presso l'Università di Siena 2010.
6. Borsa PostDoc presso l'Università di Siena, 2013-14.
7. Borsa PostDoc presso l'Università di Siena, 2014-16.
8. Borsa PostDoc presso l'Università di Siena, giugno-agosto 2016.
9. Borsa di ricerca presso il Sussex Drug Discovery Center, University of Sussex, dal 09/2016 al 07/18.
10. Borsa di ricerca presso il Sussex Drug Discovery Center, University of Sussex, dal 08/2018-ad oggi.
11. Attività di relatore orale a 4 Congressi e presentazioni poster a 3 congressi.
12. Premio Galileo Galilei Rotary Club Italiani, 2016.

Valutazione dei titoli

Il candidato MARAMAI ha conseguito la laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2008 presso l'Università degli Studi di Siena e nel 2012 il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche, presso il medesimo Ateneo, difendendo una tesi dal titolo: Design, synthesis and biological characterization of novel and selective inhibitors of enzymes of the endocannabinoid system, su una tematica inerente il SSD oggetto del bando ma che non è stato possibile valutare per mancanza del documento. Ha un Master di II livello in

Drug design and Synthesis presso la stessa Università che ha conseguito nel 2010. Presenta attività didattico-integrative propedeutiche e di recupero nel periodo settembre 2011-maggio 2012 e nel periodo novembre 2012-giugno 2013 presso la Facoltà di Farmacia dell'Università di Siena. Ha inoltre dichiarato di aver avuto una borsa PostDoc dal titolo "Sintesi di molecole bioattive" nel periodo 2013-14, una borsa PostDoc dal titolo "Sintesi di peptidomimetici e bioconiugati come farmaci antitumorali" nel periodo 2014-16 e una borsa PostDoc dal titolo "Synthesis and antitumoral drugs" nel periodo giugno-agosto 2016 tutte presso l'Università degli Studi di Siena. Successivamente, vince una borsa di ricerca dal titolo "Design and synthesis of positive allosteric modulators of GABA-A receptors selective for $\alpha 2/\alpha 3$ subunits" dal 09/2016 al 07/18 e una borsa di ricerca dal titolo "An integrated drug discovery and validation platform for the identification of novel agents targeting DNA damage response for the treatment of cancer" presso il Sussex Drug Discovery Center, University of Sussex, dal 08/2018 ad oggi. Presenta un premio assegnatogli da associazione non scientifica. L'analisi dei titoli prodotti dal candidato mette in luce un profilo curriculare di buon livello, sia per quanto riguarda la continuità temporale dell'attività di ricerca svolta, congruente con il SSD oggetto del concorso e parzialmente congruente con linee di ricerca indicate nel bando, che per l'attività didattica che gli è stata affidata.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

1. Brogi, S., Brindisi, M., Butini, S., Kshirsagar, G., Maramai, S., Chemi, G., Gemma, S., Campiani, G., Novellino, E., Fiorenzani, P., Pinassi, J., Aloisi, A. M., Gynther, M., Venskutonyte, R., Han, L., Frydenvang, K., Kastrop, J., Pickering, D. J. *Med. Chem.*, 2018, 61, 2124-2130. *Il lavoro riporta la sintesi, l'attività biologica e studi strutturali di un nuovo set di composti pirimidindionici come ligandi dei recettori AMPA e kainato. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
2. Brogi, S., Maramai, S., Brindisi, M., Chemi, G., Porcari, V., Corallo, C., Gennari, L., Novellino, E., Ramunno, A., Butini, S., Campiani, G., Gemma, S. *ChemMedChem*, 2017, 12, 2074-2085. *Il lavoro riporta la sintesi e l'attività biologica di una serie di decapeptidi che agiscono sul pathway Wnt. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2).*
3. Maramai, S., Gemma, S., Brogi, S., Campiani, G., Butini, S., Stark, H., Brindisi, M. *Front. Neurosci.* 2016,10, 451. *La pubblicazione è una review su antagonisti dopaminergici che agiscono sul recettore D3 come potenziali agenti nel trattamento di disordini neurologici. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello nel settore Neuroscienze (Q2, JCR Neuroscience).*
4. Brindisi, M., Cavella, C., Brogi, S., Nebbioso, A., Senger, J., Maramai, S., Ciotta, A., Iside, C., Butini, S., Lamponi, S., Novellino, E., Altucci, L., Jung, M., Campiani, G., Gemma, S. *Future Med Chem.* 2016, 8, 1573-87. *Il lavoro presenta la sintesi, studi modellistici e l'attività biologica di una nuova classe di fenilpirroli come inibitori dell'HDAC. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
5. Brindisi, M., Maramai, S., Brogi, S., Fanigliulo, E., Butini, S., Guarino, E., Casagni, A., Lamponi, S., Bonechi, C., Nathwani, S. M., Finetti, F., Ragonese, F., Arcidiacono, P., Campiglia, P., Valenti, S., Novellino, E., Spaocapelo, R., Morbidelli, L., Zisterer, D. M., Williams, C. D., Donati, A., Baldari, C., Campiani, G., Ulivieri, C., Gemma, S. *Eur. J. Med. Chem.* 117, 2016, 301-320. *Il lavoro descrive la sintesi di nuovi peptidi ciclici come agenti pro-apoptotici. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
6. Brindisi, M., Maramai, S., Gemma, S., Brogi, S., Grillo, A., Gabellieri, E., Lamponi, S., Tedesco, D., Di Cesare Mannelli, L., Bonfiglio, T., Jung, K-M., Armirotti, A., Luongo, L., Ligresti, A., Piscitelli, F., Bertucci, C., Campiani, G., Maione, S., Ghelardini, C., Pittaluga, A., Piomelli, D., Di Marzo, V., Butini, S. *J. Med. Chem.* 2016, 59, 2612-2632. *Il lavoro descrive la sintesi e la caratterizzazione farmacologica di nuovi agenti bloccanti del 2-*

arachidonoil glicerolo efficaci anche in modelli murini di sclerosi multipla e dolore. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).

7. Brindisi, M., Maramai, S., Grillo, A., Brogi, S., Butini, S., Novellino, E., Campiani, G., Gemma, S. *Tetrahedron Lett.* 57, 2016, 920-923. *Il lavoro descrive una procedura conveniente semplice e scalabile per la sintesi della deacetossitubuvaline, precursore della pretubulisina e suoi analoghi. La strategia sintetica permette di ottenere peptidi in ottime rese. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello nel settore Chimica organica (Q2, JCR Chemistry, Organic).*

8. Brogi, S., Butini, S., Maramai, S., Colombo, R., Verga, L., De Lorenzi, E., Lamponi, S., Andreassi, M., Bartolini, M., Andrisano, V., Novellino, E., Campiani, G., Brindisi, M., Gemma, S. *CNS Neurosci. Therapeutics* 20, 2014, 624-632. *Il lavoro descrive uno studio modellistico e un approfondimento sulle proprietà biologiche e il meccanismo d'azione di alcuni inibitori della acetilcolinesterasi umana che interferiscono con l'aggregazione del β -amiloide. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello nell'ambito Farmacologia & Farmacia (Q1, JCR Pharmacology & Pharmacy).*

9. Butini, S., Brindisi, M., Brogi, S., Maramai, S., Guarino, E., Panico, A., Saxena, A., Chauhan, V., Colombo, R., Verga, L., De Lorenzi, E., Bartolini, M., Andrisano, V., Novellino, E., Campiani, G., and Gemma, S. *ACS Med. Chem. Lett.* 2013, 4, 1178-1182. *Il lavoro descrive la sintesi studi modellistici e l'attività biologica di composti bis-tacrinici come inibitori della acetilcolinesterasi umana che modulano la formazione di fibrille β -amiloidee. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

10. Butini S., Gabellieri E., Brindisi M., Giovani S., Maramai S., Kshirsagar G., Guarino E., Brogi S., La Pietra V., Giustiniano M., Marinelli L., Novellino E., Campiani G., Cappelli A., Gemma S. *Eur. J. Med. Chem.* 70, 2013, 233-247. *Il lavoro descrive la sintesi stereoselettiva di composti peptidomimetici come inibitori di BACE1. Il lavoro è pubblicato su una rivista di alto livello (Q1).*

11. Butini, S., Brindisi, M., Gemma, S., Minetti, P., Cabri, W., Gallo, G., Vincenti, S., Talamonti, E., Borsini, F., Caprioli, A., Stasi, M. A., Di Serio, S., Ros, S., Borrelli, G., Maramai, S., Fezza, F., Campiani, G., and Maccarrone, M. *J. Med. Chem.*, 2012, 55, 6898-6915. *Il lavoro descrive la sintesi di potenti inibitori della FAAH umana e murina. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

12. Venskutonitè, R., Butini, S., Sanna Coccone, S., Gemma, S., Brindisi, M., Kumar, V., Guarino, E., Maramai, S., Valenti, S., Amir, A., Anton Valdes, E., Frydenvang, K., Kastrop, J. S., Novellino, E., Campiani, G., Pickering, D. S. *J. Med. Chem.*, 2011, 54, 4793-4805. *Il lavoro descrive la sintesi, studi modellistici, farmacologici e biostrutturali di derivati ciclopentanopirimidindionici come ligandi selettivi del recettore Kainato. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il candidato MARAMAI presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, 4 comunicazioni orali e 3 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

Il candidato MARAMAI presenta pubblicazioni originali, innovative e nelle quali si denota rigore metodologico e di ottima rilevanza considerando il panorama scientifico internazionale. La produzione è per la maggior parte congruente con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura e parzialmente inerente le linee di ricerca indicate nel bando. Le pubblicazioni presentate sono 12 ed il candidato dichiara i seguenti indici bibliometrici: (a) h index=7; (b) numero di citazioni=118. Ha partecipato come dottorando ad un finanziamento PRIN 2009 ed ha presentato i propri risultati scientifici in 4 Comunicazioni

orali e 3 presentazioni poster a Congressi. Delle 12 pubblicazioni presentate, 10 sono pubblicate su riviste del settore farmaceutico e due, una delle quali è una review (n. 3), su riviste catalogate in altri settori (n. 3 – neuroscienze JCR; n. 7 Chimica Organica JCR). Considerato quanto sopra, la produzione scientifica è buona, continua nel tempo e riportata su riviste a diffusione internazionale dotate prevalentemente di ottima collocazione editoriale. L'apporto individuale è facilmente enucleabile nella review e nel lavoro catalogabile come chimica organica, nei quali il candidato risulta primo nome. Il candidato ha raggiunto pertanto un buon livello scientifico nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08 e l'esperienza scientifica maturata dal candidato è parzialmente congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

COMMISSARIO 2

Prof. Pietro Campiglia

TITOLI

1. DOTTORATO DI RICERCA in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università degli Studi di Siena nel 2012.
2. LAUREA in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2008 conseguita presso l'Università di Siena.
3. Tutor Didattico Facoltà di Farmacia presso l'Università di Siena 2011/12.
4. Tutor Didattico Facoltà di Farmacia presso l'Università di Siena 2012/13.
5. Master II livello in Drug Design and Synthesis presso l'Università di Siena 2010.
6. Borsa PostDoc presso l'Università di Siena, 2013-14.
7. Borsa PostDoc presso l'Università di Siena, 2014-16.
8. Borsa PostDoc presso l'Università di Siena, giugno-agosto 2016.
9. Borsa di ricerca presso il Sussex Drug Discovery Center, University of Sussex, dal 09/2016 al 07/18.
10. Borsa di ricerca presso il Sussex Drug Discovery Center, University of Sussex, dal 08/2018-ad oggi.
11. Attività di relatore orale a 4 Congressi e presentazioni poster a 3 congressi.
12. Premio Galileo Galilei Rotary Club Italiani, 2016.

Valutazione sui titoli

Il candidato Maramai ha conseguito il Dottorato in Scienze Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Siena nel 2012, apparentemente trattando argomenti di ricerca che risultano inerenti il SSD oggetto del presente concorso, anche se non è stato possibile valutarne la consistenza per mancanza del manoscritto della Tesi di Dottorato. Precedentemente, il candidato aveva già conseguito un Master II livello in Drug Design and Synthesis presso la medesima Università nel 2010, ad indicazione della coerenza dei titoli con le tematiche del presente concorso. Tutte le attività successive al dottorato, rappresentate da borse PostDoc e borse di ricerca sono, parimenti, inerenti il SSD oggetto del presente concorso e congruenti con le tematiche del bando. Presenta 1 premio conferito da una associazione non scientifica. Il candidato dichiara di aver eseguito attività didattica presso l'Università degli Studi di Siena e risulta titolare di 4 comunicazioni orali e 3 poster a Congresso. Il giudizio in merito ai titoli presentati è buono.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. Brogi, S., Brindisi, M., Butini, S., Kshirsagar, G., Maramai, S., Chemi, G., Gemma, S., Campiani, G., Novellino, E., Fiorenzani, P., Pinassi, J., Aloisi, A M., Gynther, M., Venskutonyte, R., Han, L., Frydenvang, K., Kastrop, J., Pickering, D. J. Med. Chem., 2018, 61, 2124-2130. *Il lavoro riporta la sintesi, l'attività biologica e studi in silico di una piccola*

libreria di composti pirimidindionici agenti come ligandi dei recettori AMPA e kainato. Il lavoro è di ottimo livello scientifico e pubblicato su una rivista di alto profilo (Q1).

2. Brogi, S., Maramai, S., Brindisi, M., Chemi, G., Porcari, V., Corallo, C., Gennari, L., Novellino, E., Ramunno, A., Butini, S., Campiani, G., Gemma, S. ChemMedChem, 2017, 12, 2074-2085. *Il lavoro è incentrato sulla sintesi e la caratterizzazione biologica di un serie di peptidi attivanti il pathway molecolare di Wnt. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2) ed è svolto con sufficiente rigore metodologico.*

3. Maramai, S., Gemma, S., Brogi, S., Campiani, G., Butini, S., Stark, H., Brindisi, M. Front. Neurosci. 2016,10, 451. *La pubblicazione è sotto forma di review inerente antagonisti dopaminergici D3 per il trattamento farmacologico di disordini neurologici. Il lavoro è basato su un ottimo lavoro di revisione dei dati scientifici ed è pubblicato su una rivista di buon livello nel settore Neuroscienze (Q2, JCR Neuroscience).*

4. Brindisi, M., Cavella, C., Brogi, S., Nebbioso, A., Senger, J., Mararamai, S., Ciotta, A., Iside, C., Butini, S., Lamponi, S., Novellino, E., Altucci, L., Jung, M., Campiani, G., Gemma, S. Future Med Chem. 2016, 8, 1573-87. *Il lavoro è basato sulla sintesi, sugli studi in silico ed in vitro relativi a derivati fenilpirrolici inibitori dell'HDAC. La pubblicazione è caratterizzata da un buon rigore scientifico e metodologico e presenta risultati rilevanti nell'abito scientifico di riferimento. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

5. Brindisi, M., Maramai, S., Brogi, S., Fanigliulo, E., Butini, S., Guarino, E., Casagni, A., Lamponi, S., Bonechi, C., Nathwani, S. M., Finetti, F., Ragonese, F., Arcidiacono, P., Campiglia, P., Valenti, S., Novellino, E., Spaocapelo, R., Morbidelli, L., Zisterer, D. M., Williams, C. D., Donati, A., Baldari, C., Campiani, G., Ulivieri, C., Gemma, S. Eur. J. Med. Chem. 117, 2016, 301-320. *La pubblicazione è incentrata sulla sintesi di peptidi ciclici in grado di esercitare attività pro-apoptotica. I risultati ottenuti sono coerenti con le premesse scientifiche e di buona rilevanza nel panorama scientifico internazionale. Il lavoro è pubblicato su una rivista di primo livello (Q1).*

6. Brindisi, M., Maramai, S., Gemma, S., Brogi, S., Grillo, A., Gabellieri, E., Lamponi, S., Tedesco, D., Di Cesare Mannelli, L., Bonfiglio, T., Jung, K-M., Armirotti, A., Luongo, L., Ligresti, A., Piscitelli, F., Bertucci, C., Campiani, G., Maione, S., Ghelardini, C., Pittaluga, A., Piomelli, D., Di Marzo, V., Butini, S. J. Med. Chem. 2016, 59, 2612-2632. *In questo lavoro viene riportata la sintesi e la caratterizzazione in vitro di nuovi agenti bloccanti del 2-arachidonoil glicerolo. Lo studio è ampliato dalla caratterizzazione in vivo su modelli animali di sclerosi multipla e dolore. Il lavoro è pubblicato su una rivista di primissimo livello (Q1).*

7. Brindisi, M., Maramai, S., Grillo, A., Brogi, S., Butini, S., Novellino, E., Campiani, G., Gemma, S. Tetrahedron Lett. 57, 2016, 920-923. *Il lavoro descrive una nuova procedura sintetica per la sintesi di frammenti di deacetossitubuvalina, pretubulisina ed analoghi, caratterizzata dalla semplicità e scalabilità chimica. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello nel settore Chimica organica (Q2, JCR Chemistry, Organic).*

8. Bragi, S., Butini, S., Maramai, S., Colombo, R., Verga, L., De Lorenzi, E., Lamponi, S., Andreassi, M., Bartolini, M., Andrisano, V., Novellino, E., Campiani, G., Brindisi, M., Gemma, S. CNS Neurosci. Therapeutics 20, 2014, 624-632. *La pubblicazione descrive uno studio preliminare di molecular modelling per approfondire le conoscenze relative alla farmacologia di inibitori dell'acetilcolinesterasi umana in grado di interferire con la formazione delle placche di β -amiloide. Lo studio è caratterizzato da un buon rigore metodologico e scientifico e descrive risultati rilevanti nello specifico ambito scientifico. Il lavoro è pubblicato su una rivista di primo livello nell'ambito Farmacologia& Farmacia (Q1, JCR Pharmacology&Pharmacy).*

9. Butini, S., Brindisi, M., Brogi, S., Maramai, S., Guarino, E., Panico, A., Saxena, A., Chauhan, V., Colombo, R., Verga, L., De Lorenzi, E., Bartolini, M., Andrisano, V., Novellino, E., Campiani, G., and Gemma, S. ACS Med. Chem. Lett, 2013, 4, 1178-1182. *Il*

lavoro è incentrato sulla sintesi, sugli studi in silico e sulla caratterizzazione farmacologica di composti bis-tacrinici in grado di inibire l'acetilcolinesterasi umana ed interferire sulla formazione delle placche di β -amiloidee. Il lavoro è di assoluta rilevanza e caratterizzato da un notevole rigore metodologico. Il lavoro è pubblicato su una rivista di primissimo livello (Q1).

10. Butini S., Gabellieri E., Brindisi M., Giovani S., Maramai S., Kshirsagar G., Guarino E., Brogi S., La Pietra V., Giustiniano M., Marinelli L., Novellino E., Campiani G., Cappelli A., Gemma S. Eur. J. Med. Chem. 70, 2013, 233-247. *In questo lavoro è descritta la sintesi di composti peptidomimetici tramite procedure sintetiche stereo selettive in grado di inibire l'enzima BACE1. Il lavoro è caratterizzato da un buon rigore metodologico e scientifico e descrive risultati interessanti dal punto di vista dell'ambito scientifico di riferimento. Il lavoro è pubblicato su una rivista di livello elevato (Q1).*

11. Butini, S., Brindisi, M., Gemma, S., Minetti, P., Cabri, W., Gallo, G., Vincenti, S., Talamonti, E., Borsini, F., Caprioli, A., Stasi, M. A., Di Serio, S., Ros, S., Borrelli, G., Maramai, S., Fezza, F., Campiani, G., and Maccarrone, M. J. Med. Chem., 2012, 55, 6898-6915. *Nella pubblicazione sono descritti inibitori dell'enzima FAAH di nuova sintesi, caratterizzati da una notevole potenza d'azione. La pubblicazione si distingue per l'ottima caratterizzazione chimica e farmacologica dei derivati sintetizzati ed è riportato su una rivista di primo livello (Q1).*

12. Venskutonitè, R., Butini, S., Sanna Coccone, S., Gemma, S., Brindisi, M., Kumar, V., Guarino, E., Maramai, S., Valenti, S., Amir, A., Anton Valdes, E., Frydenvang, K., Kastrup, J. S., Novellino, E., Campiani, G., Pickering, D. S. J. Med. Chem., 2011, 54, 4793-4805. *La pubblicazione tratta il design, la sintesi e la caratterizzazione in silico, farmacologica e biochimica di derivati ciclopentanopirimidindionici come ligandi selettivi del recettore Kainato. La pubblicazione descrive risultati interessanti nell'ambito scientifico di riferimento su una rivista di primo livello (Q1).*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il candidato MARAMAI presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, 4 comunicazioni orali e 3 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

Il candidato MARAMAI ha presentato a valutazione numero 12 pubblicazioni, su riviste a diffusione internazionale dotate di buona collocazione editoriale. In 2 di queste pubblicazioni risulta primo autore, benchè 1 di esse riguardi tematiche non attinenti il SSD di riferimento per il presente concorso, mentre 2 presentano co-autori internazionali. La produzione scientifica è stata continua nell'arco temporale. Le pubblicazioni presentate evidenziano che il candidato ha maturato sufficiente esperienza e competenze in ambito scientifico anche se non sempre attinenti alle tematiche richieste nel bando del presente concorso. Per le pubblicazioni presentate il candidato dichiara i seguenti indici bibliometrici: (a) h index=7; (b) numero di citazioni=118. Ha partecipato come dottorando ad un finanziamento PRIN 2009 ed ha presentato i propri risultati scientifici in 4 Comunicazioni orali e 3 presentazioni poster a Congressi. Il candidato ha raggiunto pertanto un buon livello scientifico nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08.

COMMISSARIO 3

Prof.ssa Silvia Rivara

TITOLI

1. DOTTORATO DI RICERCA in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università degli Studi di Siena nel 2012.
2. LAUREA in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2008 conseguita presso l'Università di Siena.
3. Tutor Didattico Facoltà di Farmacia presso l'Università di Siena 2011/12.
4. Tutor Didattico Facoltà di Farmacia presso l'Università di Siena 2012/13.
5. Master II livello in Drug Design and Synthesis presso l'Università di Siena 2010.
6. Borsa PostDoc presso l'Università di Siena, 2013-14.
7. Borsa PostDoc presso l'Università di Siena, 2014-16.
8. Borsa PostDoc presso l'Università di Siena, giugno-agosto 2016.
9. Borsa di ricerca presso il Sussex Drug Discovery Center, University of Sussex, dal 09/2016 al 07/18.
10. Borsa di ricerca presso il Sussex Drug Discovery Center, University of Sussex, dal 08/2018-ad oggi.
11. Attività di relatore orale a 4 Congressi e presentazioni poster a 3 congressi.
12. Premio Galileo Galilei Rotary Club Italiani, 2016.

Valutazione sui titoli

Il candidato MARAMAI ha completato gli studi presso l'Università di Siena laureandosi in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2008, conseguendo un Master di II livello in Drug design and Synthesis nel 2010 e quindi il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche nel 2012. Successivamente presso l'Università di Siena ha avuto diverse borse di ricerca PostDoc nei periodi 2013-2014, 2014-2016 e nel periodo giugno-agosto 2016. Nei periodi 09/2011-05/2012 e 11/2012-06/2013 il candidato ha condotto attività didattico-integrative propedeutiche e di recupero presso la Facoltà di Farmacia dell'Università di Siena. Presso il Sussex Drug Discovery Center, University of Sussex è risultato vincitore di una borsa di ricerca relativa a Design and synthesis of positive allosteric modulators of GABA-A receptors selective for $\alpha 2/\alpha 3$ subunits" nel periodo 09/2016-07/18 e quindi di un'altra borsa dal titolo "An integrated drug discovery and validation platform for the identification of novel agents targeting DNA damage response for the treatment of cancer" dall'agosto 2018 ad oggi. Presenta un premio assegnatogli da associazione non scientifica. Sulla base dell'analisi dei titoli presentati dal candidato si evidenzia un profilo curriculare di buon livello, sia relativamente alla continuità temporale delle attività svolte, sia per la natura delle ricerche inerenti il SSD oggetto della procedura. L'esperienza scientifica maturata dal candidato è parzialmente congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. Brogi, S., Brindisi, M., Butini, S., Kshirsagar, G., Maramai, S., Chemi, G., Gemma, S., Campiani, G., Novellino, E., Fiorenzani, P., Pinassi, J., Aloisi, A. M., Gynther, M., Venskutonyte, R., Han, L., Frydenvang, K., Kastrop, J., Pickering, D. J. *Med. Chem.*, 2018, 61, 2124-2130. *Il lavoro (brief article), pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), riporta la progettazione sintesi e studio SAR di legandi dei recettori AMPA e kainato. L'applicazione di un approccio di rimpiazzamento bioisosterico ha portato ad ottenere alcuni composti ad attività antinocicettiva. Il lavoro è particolarmente interessante per la caratterizzazione della modalità di legame recettoriale ottenuta mediante analisi cristallografica.*
2. Brogi, S., Maramai, S., Brindisi, M., Chemi, G., Porcari, V., Corallo, C., Gennari, L., Novellino, E., Ramunno, A., Butini, S., Campiani, G., Gemma, S. *ChemMedChem*, 2017, 12, 2074-2085. *Il lavoro è originale e pubblicato su una rivista di buon livello (Q2); riporta la progettazione, sintesi e caratterizzazione di decapeptidi attivatori del pathway di wnt, con interessanti potenzialità nel trattamento di patologie ossee come l'osteoporosi.*

3. Maramai, S., Gemma, S., Brogi, S., Campiani, G., Butini, S., Stark, H., Brindisi, M. *Front. Neurosci.* 2016,10, 451. *Il lavoro in questione è una review pubblicata su una rivista di buon livello nel settore Neuroscienze (Q2, JCR Neuroscience) e descrive composti agenti come antagonisti del recettore dopaminergico D3 come potenziali agenti nel campo delle patologie neurologiche.*
4. Brindisi, M., Cavella, C., Brogi, S., Nebbioso, A., Senger, J., Maramai, S., Ciotta, A., Iside, C., Butini, S., Lamponi, S., Novellino, E., Altucci, L., Jung, M., Campiani, G., Gemma, S. *Future Med Chem.* 2016, 8, 1573-87. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), è relativo alla progettazione, sintesi e caratterizzazione dell'attività inibitoria su HDAC di derivati fenilpirrolici, con alcuni esponenti dotati di attività antitumorale in vitro. Il lavoro appare originale e condotto con rigore metodologico.*
5. Brindisi, M., Maramai, S., Brogi, S., Fanigliulo, E., Butini, S., Guarino, E., Casagni, A., Lamponi, S., Bonechi, C., Nathwani, S. M., Finetti, F., Ragonese, F., Arcidiacono, P., Campiglia, P., Valenti, S., Novellino, E., Spaocapelo, R., Morbidelli, L., Zisterer, D. M., Williams, C. D., Donati, A., Baldari, C., Campiani, G., Ulivieri, C., Gemma, S. *Eur. J. Med. Chem.* 117, 2016, 301-320. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), descrive la sintesi e la caratterizzazione dell'attività pro-apoptotica di peptidi lineari e ciclici. L'interazione con la tubulina viene studiata sia sperimentalmente che in silico.*
6. Brindisi, M., Maramai, S., Gemma, S., Brogi, S., Grillo, A., Gabellieri, E., Lamponi, S., Tedesco, D., Di Cesare Mannelli, L., Bonfiglio, T., Jung, K-M., Armirotti, A., Luongo, L., Ligresti, A., Piscitelli, F., Bertucci, C., Campiani, G., Maione, S., Ghelardini, C., Pittaluga, A., Piomelli, D., Di Marzo, V., Butini, S. *J. Med. Chem.* 2016, 59, 2612-2632. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), riporta uno studio approfondito e rigorosamente condotto di composti beta-lattamici inibitori selettivi dell'enzima MLG. In studi in vivo questi composti si sono rivelati utili nel contrastare il dolore e si sono rivelati efficaci in modelli sperimentali murini di sclerosi multipla.*
7. Brindisi, M., Maramai, S., Grillo, A., Brogi, S., Butini, S., Novellino, E., Campiani, G., Gemma, S. *Tetrahedron Lett.* 57, 2016, 920-923. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di buon livello nel settore Chimica organica (Q2, JCR Chemistry, Organic), riporta l'ottimizzazione di una procedura sintetica per la preparazione di deacetossitubuvaline utilizzabili nella sintesi della pretubulisina.*
8. Brogi, S., Butini, S., Maramai, S., Colombo, R., Verga, L., De Lorenzi, E., Lamponi, S., Andreassi, M., Bartolini, M., Andrisano, V., Novellino, E., Campiani, G., Brindisi, M., Gemma, S. *CNS Neurosci. Therapeutics* 20, 2014, 624-632. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello nell'ambito Farmacologia&Farmacia (Q1, JCR Pharmacology&Pharmacy), riporta un'approfondita analisi del meccanismo d'azione di composti inibitori di acetilcolinesterasi in grado di interferire anche con la aggregazione beta-amiloide e capaci di ridurre i depositi fibrillari. Studi di modellistica molecolare analizzano l'interazione con la proteina beta-amiloide e derivati.*
9. Butini, S., Brindisi, M., Brogi, S., Maramai, S., Guarino, E., Panico, A., Saxena, A., Chauhan, V., Colombo, R., Verga, L., De Lorenzi, E., Bartolini, M., Andrisano, V., Novellino, E., Campiani, G., and Gemma, S. *ACS Med. Chem. Lett.* 2013, 4, 1178-1182. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), riporta la sintesi, la caratterizzazione dell'attività biologica e studi di modellistica molecolare per derivati bis-tacrinici quali composti multi-target per il trattamento della malattia di Alzheimer poiché capaci di interferire con più meccanismi patogenetici. Il lavoro appare originale e di assoluta rilevanza.*
10. Butini S., Gabellieri E., Brindisi M., Giovani S., Maramai S., Kshirsagar G., Guarino E., Brogi S., La Pietra V., Giustiniano M., Marinelli L., Novellino E., Campiani G., Cappelli A., Gemma S. *Eur. J. Med. Chem.* 70, 2013, 233-247. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1) è originale. Il lavoro è incentrato sulla sintesi stereoselettiva,*

caratterizzazione biologica e modellistica di peptidomimetici con struttura 1,4-benzodiazepinica come inibitori dell'enzima beta-secretasi.

11. Butini, S., Brindisi, M., Gemma, S., Minetti, P., Cabri, W., Gallo, G., Vincenti, S., Talamonti, E., Borsini, F., Caprioli, A., Stasi, M. A., Di Serio, S., Ros, S., Borrelli, G., Maramai, S., Fezza, F., Campiani, G., and Maccarrone, M. *J. Med. Chem.*, 2012, 55, 6898-6915. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1) riporta la sintesi di inibitori dell'enzima FAAH, coinvolto nella degradazione dell'endocannabinoide anandamide, caratterizzati da un nucleo eteroaromatico. Il lavoro appare particolarmente rilevante per la scoperta di alcuni derivati quali potenti inibitori selettivi dell'enzima FAAH con effetti antinocicettivi in vivo.*

12. Venskutonitè, R., Butini, S., Sanna Coccone, S., Gemma, S., Brindisi, M., Kumar, V., Guarino, E., Maramai, S., Valenti, S., Amir, A., Anton Valdes, E., Frydenvang, K., Kastrop, J. S., Novellino, E., Campiani, G., Pickering, D. S. *J. Med. Chem.*, 2011, 54, 4793-4805. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), descrive la sintesi di agonisti ed antagonisti selettivi del recettore del kainato GluK1, con un'interessante indagine cristallografica che ha elucidato alcuni aspetti del comportamento del recettore in seguito a legame con i propri ligandi.*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato MARAMAI presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, 4 comunicazioni orali e 3 poster a congressi.

Valutazione sulla produzione complessiva

Il candidato MARAMAI ha presentato alla valutazione 12 pubblicazioni su riviste a diffusione internazionale prevalentemente ad ottimo impatto. La maggior parte (9 su 12) di queste pubblicazioni sono presenti in riviste del settore farmaceutico, (da Journal Citation Report), una in rivista catalogata nel settore affine di Pharmacy (JCR) e due in riviste di altri settori. Una delle pubblicazioni presentate è una review. L'apporto individuale del candidato è facilmente enucleabile nei due lavori, la review e il lavoro catalogabile nella chimica organica, nei quali egli risulta primo nome. Per le 12 pubblicazioni presentate il candidato dichiara i seguenti indici bibliometrici: (a) h index=7; (b) numero di citazioni=118 e la produzione scientifica è complessivamente buona e caratterizzata da continuità temporale. Inoltre il candidato ha presentato i risultati delle proprie ricerche in 4 Comunicazioni orali e 3 presentazioni poster a Congressi. Il livello scientifico del candidato appare buono e le attività svolte con continuità temporale sono congruenti con il SSD CHIM/08. Tuttavia l'esperienza scientifica del candidato è solo parzialmente coerente con le linee di ricerca riportate nel bando.

GIUDIZIO COLLEGALE

TITOLI

1. DOTTORATO DI RICERCA in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università degli Studi di Siena nel 2012.
2. LAUREA in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2008 conseguita presso l'Università di Siena.
3. Tutor Didattico Facoltà di Farmacia presso l'Università di Siena 2011/12.
4. Tutor Didattico Facoltà di Farmacia presso l'Università di Siena 2012/13.
5. Master II livello in Drug Design and Synthesis presso l'Università di Siena 2010.
6. Borsa PostDoc presso l'Università di Siena, 2013-14.
7. Borsa PostDoc presso l'Università di Siena, 2014-16.

8. Borsa PostDoc presso l'Università di Siena, giugno-agosto 2016.
9. Borsa di ricerca presso il Sussex Drug Discovery Center, University of Sussex, dal 09/2016 al 07/18.
10. Borsa di ricerca presso il Sussex Drug Discovery Center, University of Sussex, dal 08/2018-ad oggi.
11. Attività di relatore orale a 4 Congressi e presentazioni poster a 3 congressi.
12. Premio Galileo Galilei Rotary Club Italiani, 2016.

Valutazione sui titoli

Il candidato MARAMAI ha conseguito la laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2008 presso l'Università degli Studi di Siena e nel 2012 il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche, presso il medesimo Ateneo. Ha un Master di II livello in Drug design and Synthesis presso la stessa Università che ha conseguito nel 2010. Ha svolto attività didattica nel periodo 2011-2013. Ha svolto attività di ricerca congruenti con il SSD oggetto del bando, acclerate da borse PostDoc e borse di ricerca. Presenta 1 premio conferito da una associazione non scientifica. L'analisi dei titoli prodotti dal candidato mette in luce un profilo curriculare di buon livello, sia per quanto riguarda la continuità temporale dell'attività di ricerca svolta, che per l'attività didattica che gli è stata affidata. L'esperienza scientifica maturata dal candidato è parzialmente congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. Brogi, S., Brindisi, M., Butini, S., Kshirsagar, G., Maramai, S., Chemi, G., Gemma, S., Campiani, G., Novellino, E., Fiorenzani, P., Pinassi, J., Aloisi, A M., Gynther, M., Venskutonyte, R., Han, L., Frydenvang, K. , Kastrop, J., Pickering, D. J. *Med. Chem.*, 2018, 61, 2124-2130. *Il lavoro riporta un nuovo set di composti pirimidindionici come ligandi dei recettori AMPA e kainato. Sono descritte la sintesi, l'attività biologica e studi strutturali. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
2. Brogi, S., Maramai, S., Brindisi, M., Chemi, G., Porcari, V., Corallo, C., Gennari, L., Novellino, E., Ramunno, A., Butini, S., Campiani, G., Gemma, S. *ChemMedChem*, 2017, 12, 2074-2085. *Il lavoro descrive la sintesi e l'attività biologica di alcuni decapeptidi che agiscono sul pathway Wnt. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2).*
3. Maramai, S., Gemma, S., Brogi, S., Campiani, G., Butini, S., Stark, H., Brindisi, M. *Front. Neurosci.* 2016,10, 451. *La pubblicazione è una review su antagonisti dopaminergici che agiscono sul recettore D3 come potenziali agenti nel trattamento di disordini neurologici. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello nel settore Neuroscienze (Q2, JCR Neuroscience).*
4. Brindisi, M., Cavella, C., Brogi, S., Nebbioso, A., Senger, J., Mararamai, S., Ciotta, A., Iside, C., Butini, S., Lamponi, S., Novellino, E., Altucci, L., Jung, M., Campiani, G., Gemma, S. *Future Med Chem.* 2016, 8, 1573-87. *Il lavoro presenta una nuova classe di fenilpirroli come inibitori dell'HDAC. E' descritta la sintesi, studi modellistici e l'attività biologica. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
5. Brindisi, M., Maramai, S., Brogi, S., Fanigliulo, E., Butini, S., Guarino, E, Casagni, A, Lamponi, S., Bonechi, C., Nathwani, S. M., Finetti, F., Ragonese, F., Arcidiacono, P., Campiglia, P., Valenti, S., Novellino, E, Spaocapelo, R., Morbidelli, L., Zisterer, D. M., Williams, C. D., Donati, A., Baldari, C., Campiani, G., Ulivieri, C., Gemma, S. *Eur. J. Med. Chem.* 117, 2016, 301-320. *Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1) e descrive la sintesi di nuovi peptidi ciclici come agenti pro-apoptotici.*
6. Brindisi, M., Maramai, S., Gemma, S., Brogi, S., Grillo, A., Gabellieri, E., Lamponi, S., Tedesco, D., Di Cesare Mannelli, L., Bonfiglio, T., Jung, K-M., Armirotti, A., Luongo, L., Ligresti, A., Piscitelli, F., Bertucci, C., Campiani, G., Maione, S., Ghelardini, C., Pittaluga, A., Piomelli, D., Di Marzo, V., Butini, S. *J. Med. Chem.* 2016, 59, 2612-2632. *Il lavoro*

descrive la sintesi e la caratterizzazione farmacologica di nuovi agenti che inibiscono la degradazione del 2-arachidonoil glicerolo che risultano efficaci in modelli murini di sclerosi multipla e dolore. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).

7. Brindisi, M., Maramai, S., Grillo, A., Brogi, S., Butini, S., Novellino, E., Campiani, G., Gemma, S. *Tetrahedron Lett.* 57, 2016, 920-923. *Il lavoro descrive una nuova strategia sintetica che permette di ottenere peptidi analoghi della deacetossitubuvalina, precursore della Pretubulisina mediante una sintesi che dà ottime rese e che è semplice e scalabile. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello nel settore Chimica organica (Q2, JCR Chemistry, Organic).*

8. Bragi, S., Butini, S., Maramai, S., Colombo, R., Verga, L., De Lorenzi, E., Lamponi, S., Andreassi, M., Bartolini, M., Andrisano, V., Novellino, E., Campiani, G., Brindisi, M., Gemma, S. *CNS Neurosci. Ther.* 20, 2014, 624-632. *Il lavoro descrive alcuni inibitori della acetilcolinesterasi umana che interferiscono con l'aggregazione del β -amiloide. E' riportato uno studio modellistico e un approfondimento sulle proprietà biologiche e il meccanismo d'azione di tali composti. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello nell'ambito Farmacologia& Farmacia (Q1, JCR Pharmacology&Pharmacy).*

Butini, S., Brindisi, M., Brogi, S., Maramai, S., Guarino, E., Panico, A., Saxena, A., Chauhan, V., Colombo, R., Verga, L., De Lorenzi, E., Bartolini, M., Andrisano, V., Novellino, E., Campiani, G., and Gemma, S. *ACS Med. Chem. Lett.* 2013, 4, 1178-1182. *Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1). Esso descrive la sintesi studi modellistici e l'attività biologica di composti bis-tacrinici come inibitori della acetilcolinesterasi umana che modulano la formazione di fibrille β -amiloidee.*

10. Butini S., Gabellieri E., Brindisi M., Giovani S., Maramai S., Kshirsagar G., Guarino E., Brogi S., La Pietra V., Giustiniano M., Marinelli L., Novellino E., Campiani G., Cappelli A., Gemma S. *Eur. J. Med. Chem.* 70, 2013, 233-247. *Il lavoro descrive la sintesi stereoselettiva di composti peptidomimetici come inibitori di BACE1. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q1).*

11. Butini, S., Brindisi, M., Gemma, S., Minetti, P., Cabri, W., Gallo, G., Vincenti, S., Talamonti, E., Borsini, F., Caprioli, A., Stasi, M. A., Di Serio, S., Ros, S., Borrelli, G., Maramai, S., Fezza, F., Campiani, G., and Maccarrone, M. *J. Med. Chem.* 2012, 55, 6898-6915. *Il lavoro descrive la sintesi di potenti inibitori della FAAH. I composti hanno attività sia sul target murino che su quello umano. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

12. Venskutonitè, R., Butini, S.; Sanna Coccone, S.; Gemma, S.; Brindisi, M.; Kumar, V.; Guarino, E.; Maramai, S.; Valenti, S.; Amir, A.; Anton Valdes, E.; Frydenvang, K.; Kastrup, J. S.; Novellino, E.; Campiani, G.; Pickering, D. S. *J. Med. Chem.* 2011, 54, 4793-4805. *Il lavoro descrive la sintesi, studi modellistici, farmacologici e biostrutturali di derivati ciclopentapirimidindionici come ligandi selettivi del recettore Kainato. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il candidato MARAMAI presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, 4 comunicazioni orali e 3 poster a congressi.

Valutazione sulla produzione complessiva

Il candidato MARAMAI presenta 12 pubblicazioni e i seguenti indici bibliometrici: (a) h index=7; (b) numero di citazioni=118. I lavori sono originali, innovativi e di ottima rilevanza considerando il panorama scientifico internazionale e sono riportati su riviste dotate prevalentemente di ottima collocazione editoriale. La produzione scientifica è continua nel tempo, complessivamente buona e per la maggior parte congruente con il SSD CHIM/08

per il quale è bandita la procedura. L'apporto individuale è facilmente enucleabile in una review e nel lavoro catalogabile come chimica organica nei quali il candidato risulta primo nome. Comunque, tenuto conto anche dell'attività scientifica globale sviluppata dal candidato stesso, la Commissione ritiene che vi siano evidenti elementi di giudizio per individuare il suo apporto alla progettazione e sintesi, anche nelle pubblicazioni dove non è in evidenza. Delle 12 pubblicazioni presentate, 10 sono pubblicate su riviste del settore chimico farmaceutico (o assimilabile, Pharmacy JCR) e due sono riportate su riviste catalogate in altri settori (neuroscienze; Chimica Organica, JCR); una delle pubblicazioni (n. 3) è una review. Ha partecipato come dottorando ad un finanziamento PRIN 2009 ed ha presentato i propri risultati scientifici in 4 Comunicazioni orali e 3 presentazioni poster a Congressi. Il candidato ha raggiunto pertanto un buon livello scientifico nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08. L'esperienza scientifica maturata dal candidato è parzialmente congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

CANDIDATO: MESSORE ANTONELLA

COMMISSARIO 1

Prof. Roberto Di Santo

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2016.
2. Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2012 conseguita presso l'Università di Roma "La Sapienza".
3. Assistenza ad esercitazioni di laboratorio per il corso di "Analisi Chimico Farmaceutica e Tossicologica II" presso l'Università di Roma "La Sapienza" AA 2012/13, 2013/14.
4. Lezioni di approfondimento per il corso di "Chimica Farmaceutica e Tossicologica II" presso l'Università di Roma "La Sapienza" AA 2012/13, 2013/14, 2014/15.
5. Tutoraggio in Stechiometria per le Facoltà di "Ingegneria Bioenergetica", "Ingegneria Aerospaziale" ed "Ingegneria clinica" presso l'Università di Roma "La Sapienza" dal AA 2013/14.
6. Tutoraggio in Stechiometria per le Facoltà di "Ingegneria Bioenergetica", "Ingegneria Aerospaziale" ed "Ingegneria clinica" presso l'Università di Roma "La Sapienza" dal 01/11/2015 al 01/07/2016.
7. Lezioni di Chimica Farmaceutica nell'ambito del "Master di II livello in nutraceutica e cosmetica di prodotti di origine vegetale" presso l'Università di Roma "La Sapienza" AA 2015/16.
8. Contratto di ricerca occasionale presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza", dal 01/07/2012 al 30/07/2012.
9. Borsa PostDoc presso l'Istituto Italiano di Tecnologia (IIT) Genova dal 01/12/2016-oggi.
10. Domanda di brevetto internazionale Application Number EP17163014 (2017).
11. 18 comunicazioni poster a congressi.

Valutazione dei titoli

La candidata MESSORE ha conseguito la Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2012 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" e nel 2016 il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche presso il medesimo Ateneo difendendo una tesi dal titolo: Quinolinonyl Derivatives as anti-HIV agents. Ha svolto parte della tesi di Dottorato all'estero presso l'Università di Anversa, sotto il tutoraggio del Prof. Koen Augustyns. Ha

svolto un'attività didattica copiosa in relazione alla durata della sua carriera accademica e delineabile come segue: assistenza ad esercitazioni di laboratorio per il corso di "Analisi Chimico Farmaceutica e Tossicologica II" presso l'Università degli Studi Roma "La Sapienza" AA 2012/13 e nel successivo AA 2013/14; lezioni di approfondimento per il corso di "Chimica Farmaceutica e Tossicologica II" presso l'Università degli Studi Roma "La Sapienza" negli AA 2012/13, 2013/14, 2014/15; tutoraggio in Stechiometria per le Facoltà di "Ingegneria Bioenergetica", "Ingegneria Aerospaziale" ed "Ingegneria clinica" presso l'Università degli Studi Roma "La Sapienza" nell'AA 2013/14; Tutoraggio in Stechiometria per le Facoltà di "Ingegneria Bioenergetica", "Ingegneria Aerospaziale" ed "Ingegneria clinica" presso l'Università degli Studi Roma "La Sapienza" dal 01/11/2015 al 01/07/2016. Ha avuto un contratto per supporto alla ricerca dal titolo "Acidi pirrolid dichetoeseoici come nuovi agenti anti-HIV che agiscono sulla funzione ribonucleasi H dell'enzima trascrittasi inversa di HIV-1" presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", dal 01/07/2012 al 30/07/2012. Dal 01/12/2016 acquisisce una posizione come PostDoc presso l'Istituto Italiano di Tecnologia (IIT) a Genova, posizione che ricopre attualmente. E' coinventore in una domanda di brevetto internazionale. L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata mette in luce un profilo curriculare di buon livello, anche in relazione alla giovane età accademica, sia per quanto riguarda la continuità temporale dell'attività di ricerca svolta, che per la copiosa attività didattica che le è stata affidata. Il profilo curriculare è congruente con il SSD oggetto del concorso e con linee di ricerca indicate nel bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

- 1) Costi R, Crucitti GC, Pescatori L, Messore A, Scipione L, Tortorella S, Amoroso A, Crespan E, Campiglia P, Maresca B, Porta A, Granata I, Novellino E, Gouge J, Delarue M, Maga G, Di Santo R. J. Med. Chem. 2013, 56, 7431-41. *Il lavoro descrive la progettazione sintesi e attività biologica di nuovi composti non nucleosidici a struttura dichetoacida che inibiscono la teminal desossinucleotidil trasferasi umana. Sono riportati anche studi strutturalistici che delineano le interazioni tra tali inibitori ed il target biologico. La ricerca descritta denota rigore metodologico ed è di grande interesse nel campo dei prodotti antitumorali. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 2) Costi R, Metifiot M, Esposito F, Cuzzucoli Crucitti G, Pescatori L, Messore A, Scipione L, Tortorella S, Zinzula L, Novellino E, Pommier Y, Tramontano E, Marchand C, Di Santo R. J. Med. Chem. 2013, 56, 8588-98. *Il lavoro descrive una serie di pirrolidichetoacidi che inibiscono sia l'integrasi che la ribonucleasi H della trascrittasi inversa di HIV-1. Sono descritti come inibitori duali proponendo un approccio multi-target nella terapia anti-HIV-1, approccio molto innovativo e rilevante nel settore degli antiretrovirali. Lo studio è condotto con grande rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 3) Costi R, Metifiot M, Chung S, Cuzzucoli Crucitti G, Maddali K, Pescatori L, Messore A, Madia VN, Pupo G, Scipione L, Tortorella S, Di Leva FS, Cosconati S, Marinelli L, Novellino E, Le Grice SF, Corona A, Pommier Y, Marchand C, Di Santo R. J Med Chem. 2014, 57, 3223-34. *La pubblicazione descrive la progettazione e sintesi di composti chinolonidichetoacidi caratterizzati da un sostituito amminico, come inibitori dell'integrasi di HIV-1. I composti sono ben caratterizzati sia da un punto di vista chimico che delle proprietà farmacologiche. Tali composti infatti sono anche studiati per valutare l'interazione con un altro target virale, la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa dell'HIV-1. Il lavoro è molto ben condotto ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 4) Cuzzucoli Crucitti G, Metiflot M, Pescatori L, Messore A, Madia VN, Pupo G, Saccoliti F, Scipione L, Tortorella S, Esposito F, Corona A, Cadeddu M, Marchand C, Pommier Y, Tramontano E, Costi R, Di Santo R. J Med Chem. 2015, 58, 1915-28. *Nella pubblicazione*

in oggetto è presentato uno studio SAR su composti pirrolidichetoacidi che risultano inibitori duali dell'integrasi e della ribonucleasi H di HIV-1. I composti mostrano anche un'ottima attività in cellula infettata dal virus. Tale studio è molto rilevante soprattutto per l'aspetto di novità dell'approccio multi-target nel campo dell'HIV-1. E' condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1).

5) Pescatori L, Metifiot M, Chung S, Masoaka T, Cuzzucoli Crucitti G, Messore A, Pupo G, Madia VN, Saccoliti F, Scipione L, Tortorella S, Di Leva FS, Cosconati S, Marinelli L, Novellino E, Le Grice SF, Pommier Y, Marchand C, Costi R, Di Santo R. J Med Chem. 2015, 58, 4610-23. *Studio SAR su composti chinolinonil dichetoacidi nel quale sono definiti i requisiti strutturali per indirizzare l'azione contro l'enzima integrasi di HIV, anziché contro la funzione ribonucleasica della trascrittasi inversa. Il lavoro è ben condotto e realizzato ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

6) Cuzzucoli Crucitti G, Pescatori L, Messore A, Madia VN, Pupo G, Saccoliti F, Scipione L, Tortorella S, Di Leva FS, Cosconati S, Novellino E, Debyser Z, Christ F, Costi R, Di Santo R. Eur. J. Med. Chem. 2015, 101, 288-94. *Il lavoro descrive la scoperta di una classe di composti a struttura N-aril-naftilamminica che vengono riposizionati come composti ad attività inibitrice nei confronti dell'interazione proteina-proteina integrasi dell'HIV-1/LEDGF umana. Il lavoro è molto originale e ben condotto. E' stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

7) Das KK, Razzaghi-Asl N, Tikare SN, Di Santo R, Costi R, Messore A, Pescatori L, Crucitti GC, Jargar JG, Dhundasi SA, Saso L. J. Enz. Inhib. Med. Chem. 2016, 31, 99-105. *La pubblicazione descrive l'attività ipoglicemizzante di alcuni composti a struttura curcuminoide. Tali composti mostrano anche azione in modelli murini in esperimenti condotti in vivo. Il lavoro porta interessanti avanzamenti nel settore è condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

8) Madia VN, Benedetti R, Barreca ML, Ngo L, Pescatori L, Messore A, Pupo G, Saccoliti F, Valente S, Mai A, Scipione L, Zheng YG, Tintori C, Sotta M, Cecchetti V, Altucci L, Di Santo R, Costi R. ChemMedChem. 2017, 12, 1359-1368. *Il lavoro descrive le SAR di una serie di composti a struttura base cinnamoilica in grado di inibire un target epigenetico: l'istone acetil transferasi p300. Lo studio è condotto con rigore metodologico e porta interessanti avanzamenti in questo settore di indagine. E' pubblicato su una rivista di buon livello (Q2).*

9) Saccoliti F, Angiulli G, Pupo G, Pescatori L, Madia VN, Messore A, Colotti G, Fiorillo A, Scipione L, Gramiccia M, Di Muccio T, Di Santo R, Costi R, Ilari A. J Enz. Inhib. Med. Chem. 2017, 32, 304-310. *Il lavoro descrive la scoperta di un nuovo inibitore della tripanotione reductasi di Leishmania infantum. Sono riportati sia studi strutturalistici che la caratterizzazione biochimica. Lo studio è rilevante dal momento che riporta un nuovo inibitore di questo target che si propone come importante punto di partenza per lo sviluppo di una nuova classe di composti antiprotozoari. Il lavoro denota grande rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

10) Basilicata MG, Pepe G, Adesso S, Ostacolo C, Sala M, Sommella E, Scala MC, Messore A, Autore G, Marzocco S, Campiglia P. Int. J. Mol. Sci. 2018, 19. pii: E1955. *Il lavoro descrive le proprietà antiossidanti di prodotti di latticini a base di latte di bufala. In particolare è descritta l'azione di un peptide rilasciato dopo la digestione GI di ricotta di bufala che riduce lo stress ossidativo in cellule epiteliali intestinali. Il lavoro è condotto con rigore metodologico e apporta interessanti avanzamenti nell'ambito alimentare. E' pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 - multidisciplinare).*

11) Saccoliti F, Madia VN, Tudino V, De Leo A, Pescatori L, Messore A, De Vita D., Scipione L, Brun R, Kaiser M, Maser P, Magalhaes Calvet C, K. Jennings G, M. Podust L, Costi R, Di Santo R. Eur. J. Med. Chem. 2018, 156, 53-60. *Il lavoro descrive il riposizionamento di alcuni agenti antifungini azolici nel campo dei composti ad azione*

antiprotozoaria e ne viene valutata anche l'attività in vivo. Il lavoro è ben strutturato e molto rilevante nel settore dei farmaci antitripanosomiaci. E' pubblicato in una rivista di ottimo livello (Q1).

TESI DOTTORATO

Titolo: Quinolinonyl Derivatives as anti-HIV agents. La tesi presentata dalla candidata descrive la progettazione e sintesi di derivati chinolonici come potenti agenti anti-HIV attivi contro target virali quali l'integrasi e la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa. La tesi appare sviluppata in modo eccellente, con rigore scientifico e metodologico.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La candidata MESSORE presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 11 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, 1 domanda di brevetto, tesi Dottorato, 18 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

La candidata MESSORE presenta pubblicazioni originali, innovative e nelle quali si denota rigore metodologico e di ottima rilevanza nell'ambito del panorama scientifico internazionale. La produzione è congruente con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. La produzione scientifica è buona, continua nel tempo e riportata su riviste a diffusione internazionale prevalentemente di ottima collocazione editoriale e diffusione all'interno della comunità scientifica. E' quantificabile in 12 pubblicazioni, 1 tesi di dottorato, 1 domanda di brevetto. Per le 11 pubblicazioni presentate la candidata dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 6$; Citazioni totali = 112; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 10,18; IF Totale (11 pubblicazioni) = 49,912; IF Medio: 4,52. L'apporto individuale è facilmente enucleabile in una pubblicazione nella quale la candidata è riportata come primo nome. La candidata ha presentato i propri risultati scientifici in 18 presentazioni poster a Congressi. Si conclude che la candidata ha raggiunto un buon livello scientifico nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08, congruenti con linee di ricerca indicate nel bando.

COMMISSARIO 2

Prof. Pietro Campiglia

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2016.
2. Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2012 conseguita presso l'Università di Roma "La Sapienza".
3. Assistenza ad esercitazioni di laboratorio per il corso di "Analisi Chimico Farmaceutica e Tossicologica II" presso l'Università di Roma "La Sapienza" AA 2012/13, 2013/14.
4. Lezioni di approfondimento per il corso di "Chimica Farmaceutica e Tossicologica II" presso l'Università di Roma "La Sapienza" AA 2012/13, 2013/14, 2014/15.
5. Tutoraggio in Stechiometria per le Facoltà di " Ingegneria Bioenergetica", "Ingegneria Aerospaziale" ed "Ingegneria clinica" presso l'Università Roma "La Sapienza" dal AA 2013/14.
6. Tutoraggio in Stechiometria per le Facoltà di " Ingegneria Bioenergetica", "Ingegneria Aerospaziale" ed "Ingegneria clinica" presso l'Università Roma "La Sapienza" dal 01/11/2015 al 01/07/2016.

7. Lezioni di Chimica Farmaceutica nell'ambito del "Master di II livello in nutraceutica e cosmetica di prodotti di origine vegetale" presso l'Università degli Studi Roma "La Sapienza" AA 2015/16.
8. Contratto di ricerca occasionale presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza", dal 01/07/2012 al 30/07/2012.
9. Borsa PostDoc presso l'Istituto Italiano di Tecnologia (IIT) Genova dal 01/12/2016-oggi.
10. Domanda di brevetto internazionale Application Number EP17163014 (2017).
11. 18 comunicazioni poster a congressi.

Valutazione sui titoli

La candidata Messoro ha conseguito il Dottorato in Scienze Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" nel 2016, trattando del design e la sintesi nuovi inibitori del virus HIV-1, argomento in linea con il SSD oggetto del presente concorso. Tutte le attività successive al dottorato, rappresentate da contratti di collaborazione occasionale e borse PostDoc sono, parimenti, inerenti il SSD oggetto del presente concorso e congruenti con le tematiche del bando, così come l'attività didattica svolta presso corsi Universitari e Master di II livello. La candidata risulta titolare di 18 poster a Congresso e di una domanda di brevetto. Il giudizio in merito ai titoli presentati è buono.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

- 1) Costi R, Crucitti GC, Pescatori L, Messoro A, Scipione L, Tortorella S, Amoroso A, Crespan E, Campiglia P, Maresca B, Porta A, Granata I, Novellino E, Gouge J, Delarue M, Maga G, Di Santo R. *J. Med. Chem.* 2013, 56, 7431-41. *Il lavoro è incentrato sul design, la sintesi e la valutazione farmacologica di nuovi composti a struttura dichetoacida in grado di inibire la desossinucleotidil trasferasi umana. Sono riportati anche studi cristallografici che definiscono le basi molecolari dell'interazione tra le molecole ed il loro bersaglio biologico. La ricerca descritta denota rigore metodologico ed è di grande interesse nel campo scientifico di riferimento. E' pubblicato su una rivista di primissimo livello (Q1).*
- 2) Costi R, Metifiot M, Esposito F, Cuzzucoli Crucitti G, Pescatori L, Messoro A, Scipione L, Tortorella S, Zinzula L, Novellino E, Pommier Y, Tramontano E, Marchand C, Di Santo R. *J. Med. Chem.* 2013, 56, 8588-98. *Il lavoro è incentrato sulla sintesi di derivati pirroildichetoacidi come doppi inibitori sia dell'integrasi che della ribonucleasi H del virus HIV-1. L'approccio seguito è innovativo nel campo scientifico di riferimento, persegue un notevole rigore metodologico ed il lavoro è pubblicato su una rivista di primissimo livello (Q1).*
- 3) Costi R, Metifiot M, Chung S, Cuzzucoli Crucitti G, Maddali K, Pescatori L, Messoro A, Madia VN, Pupo G, Scipione L, Tortorella S, Di Leva FS, Cosconati S, Marinelli L, Novellino E, Le Grice SF, Corona A, Pommier Y, Marchand C, Di Santo R. *J Med Chem.* 2014, 57, 3223-34. *La pubblicazione è incentrata sul design e la sintesi di derivati chinolonil dicheto acidi agenti come inibitori dell'integrasi di HIV-1. Il lavoro è caratterizzato dall'importanza scientifica, dal rigore metodologico e dall'originalità. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1)*
- 4) Cuzzucoli Crucitti G, Metiflot M, Pescatori L, Messoro A, Madia VN, Pupo G, Saccoliti F, Scipione L, Tortorella S, Esposito F, Corona A, Cadeddu M, Marchand C, Pommier Y, Tramontano E, Costi R, Di Santo R. *J Med Chem.* 2015, 58, 1915-28. *Nella pubblicazione in oggetto è presentato uno studio SAR su composti pirroilil dichetoacidi che risultano inibitori duali dell'integrasi e della ribonucleasi H di HIV-1. I composti mostrano anche un'ottima attività in cellula infettata dal virus. Tale studio è molto rilevante soprattutto per*

l'aspetto di novità dell'approccio multi-target nel campo dell'HIV-1. E' condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1).

5) Pescatori L, Metifiot M, Chung S, Masoaka T, Cuzzucoli Crucitti G, Messore A, Pupo G, Madia VN, Saccoliti F, Scipione L, Tortorella S, Di Leva FS, Cosconati S, Marinelli L, Novellino E, Le Grice SF, Pommier Y, Marchand C, Costi R, Di Santo R. J Med Chem. 2015, 58, 4610-23. *Il lavoro è incentrato sulle relazioni struttura-attività concernenti composti chinolinonil dichetoacidi atti a definire i requisiti strutturali in grado di determinare un'azione selettiva verso l'enzima integrasi di HIV, piuttosto che verso la funzione ribonucleasica della trascrittasi inversa. Il lavoro è ottimamente condotto e realizzato ed è pubblicato su una rivista di primissimo livello (Q1).*

6) Cuzzucoli Crucitti G, Pescatori L, Messore A, Madia VN, Pupo G, Saccoliti F, Scipione L, Tortorella S, Di Leva FS, Cosconati S, Novellino E, Debyser Z, Christ F, Costi R, Di Santo R. Eur J Med Chem. 2015, 101, 288-94. *Il lavoro è incentrato sull'identificazione di derivati N-aril-naftilamminici e loro riposizionamento come inibitori nei confronti dell'interazione proteina-proteina integrasi dell'HIV-1/LEDGF umana. Il lavoro è molto originale e ben condotto. E' stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

7) Das KK, Razzaghi-Asl N, Tikare SN, Di Santo R, Costi R, Messore A, Pescatori L, Crucitti GC, Jargar JG, Dhundasi SA, Saso L. J Enz. Inhib. Med. Chem. 2016, 31, 99-105. *Il lavoro descrive derivati analoghi della curcumina in grado di svolgere attività ipoglicemizzante in vitro ed in vivo, adoperando modelli murini di iperglicemia. Il lavoro è piuttosto rilevante nell'ambito scientifico di riferimento ed è condotto con rigore metodologico. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

8) Madia VN, Benedetti R, Barreca ML, Ngo L, Pescatori L, Messore A, Pupo G, Saccoliti F, Valente S, Mai A, Scipione L, Zheng YG, Tintori C, Sotta M, Cecchetti V, Altucci L, Di Santo R, Costi R. ChemMedChem. 2017, 12, 1359-1368. *Il lavoro si basa sulla definizione delle relazioni struttura-attività di una libreria di composti a struttura cinnamoilica in grado di inibire l'istone acetil transferasi p300. Lo studio è condotto con rigore metodologico e reca interessanti spunti ed avanzamenti in questo ambito scientifico. E' pubblicato su una rivista di buon livello (Q2).*

9) Saccoliti F, Angiulli G, Pupo G, Pescatori L, Madia VN, Messore A, Colotti G, Fiorillo A, Scipione L, Gramiccia M, Di Muccio T, Di Santo R, Costi R, Ilari A. J Enz. Inhib. Med. Chem. 2017, 32, 304-310. *Il lavoro descrive la scoperta di un nuovo diaril solfuro inibitore della tripanotione reduttasi del parassita Leishmania infantum. Lo studio è basato sulla determinazione delle caratteristiche strutturali di interazione con il target e conseguente valutazione farmacologica. Il lavoro denota grande rigore metodologico, rilevanza scientifica ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

10) Basilicata MG, Pepe G, Adesso S, Ostacolo C, Sala M, Sommella E, Scala MC, Messore A, Autore G, Marzocco S, Campiglia P. Int. J. Mol. Sci. 2018, 19, pii: E1955. *Il lavoro è incentrato sull'identificazione, sintesi e caratterizzazione farmacologica di una sequenza peptidica criptata all'interno delle proteine di ricotta di bufala e rilasciato dopo digestione gastrointestinale, di cui vengono valutate le proprietà antiossidanti. Il lavoro è caratterizzato da rigore metodologico ed innovatività scientifica ed apporta interessanti avanzamenti nell'ambito farmaceutico-alimentare. E' pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 - multidisciplinare).*

11) Saccoliti F, Madia VN, Tudino V, De Leo A, Pescatori L, Messore A, De Vita D., Scipione L, Brun R, Kaiser M, Maser P, Magalhaes Calvet C, K. Jennings G, M. Podust L, Costi R, Di Santo R. Eur. J. Med. Chem. 2018, 156, 53-60. *Il lavoro descrive un processo di drug-repositioning di nuclei azolici ad originale attività antifungina nel campo degli antiprotozoari, con conseguente valutazione farmacologica in vivo. Il lavoro è originale, persegue rigore scientifico ed è molto rilevante nel settore drug discovery. E' pubblicato in una rivista di primissimo livello (Q1).*

TESI DOTTORATO

Titolo: Quinolinonyl Derivatives as anti-HIV agents. La tesi presentata dalla candidata descrive la progettazione e sintesi di derivati chinolonici che hanno come target l'integrasi e la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa dell'HIV-1. Ne riporta con grande metodo anche la valutazione biologica contro i target molecolari e contro cellule infettate dal virus. La tesi appare sviluppata in modo eccellente, con rigore scientifico e metodologico.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La candidata MESSORE presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 11 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, 1 domanda di brevetto, tesi Dottorato, 18 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

La candidata MESSORE ha presentato a valutazione numero 11 pubblicazioni, su riviste a diffusione internazionale dotate di buona collocazione editoriale. In 1 di queste pubblicazioni risulta primo autore, mentre 9 presentano co-autori internazionali. La produzione scientifica è stata continua nell'arco temporale considerato e ha notevole attinenza con il SSD oggetto del presente concorso. Lo stesso dicasi per i poster presentati a congresso. Le pubblicazioni presentate evidenziano che la candidata ha maturato buona esperienza e competenze in ambiti attinenti alle tematiche richieste nel bando del presente concorso. La produzione globalmente è quantificabile in 12 pubblicazioni, 1 tesi di dottorato, 1 domanda di brevetto. Per le 11 pubblicazioni presentate la candidata dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 6$; Citazioni totali = 112; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 10,18; IF Totale (11 pubblicazioni) = 49,912; IF Medio: 4,52. L'esperienza scientifica maturata dalla candidata è congruente con le tematiche del bando, e la candidata mostra di aver raggiunto un buon livello scientifico nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08.

COMMISSARIO 3

Prof.ssa Silvia Rivara

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2016.
2. Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2012 conseguita presso l'Università di Roma "La Sapienza".
3. Assistenza ad esercitazioni di laboratorio per il corso di "Analisi Chimico Farmaceutica e Tossicologica II" presso l'Università di Roma "La Sapienza" AA 2012/13, 2013/14.
4. Lezioni di approfondimento per il corso di "Chimica Farmaceutica e Tossicologica II" presso l'Università di Roma "La Sapienza" AA 2012/13, 2013/14, 2014/15.
5. Tutoraggio in Stechiometria per le Facoltà di "Ingegneria Bioenergetica", "Ingegneria Aerospaziale" ed "Ingegneria clinica" presso l'Università Roma "La Sapienza" dal AA 2013/14.
6. Tutoraggio in Stechiometria per le Facoltà di "Ingegneria Bioenergetica", "Ingegneria Aerospaziale" ed "Ingegneria clinica" presso l'Università Roma "La Sapienza" dal 01/11/2015 al 01/07/2016.

7. Lezioni di Chimica Farmaceutica nell'ambito del "Master di II livello in nutraceutica e cosmetica di prodotti di origine vegetale" presso l'Università degli Studi Roma "La Sapienza" AA 2015/16.
8. Contratto di ricerca occasionale presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza", dal 01/07/2012 al 30/07/2012.
9. Borsa PostDoc presso l'Istituto Italiano di Tecnologia (IIT) Genova dal 01/12/2016-oggi.
10. Domanda di brevetto internazionale Application Number EP17163014 (2017).
11. 18 comunicazioni poster a congressi.

Valutazione sui titoli

La candidata MESSORE si è laureata in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2012 e ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche nel 2016 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con una tesi su nuovi agenti antivirali, svolgendo parte del Dottorato presso l'Università di Anversa. L'attività didattica, svolta presso l'università di Roma "La Sapienza" risulta intensa e consiste in assistenza ad esercitazioni di laboratorio negli anni 2012-13 e 2013-14 e lezioni di approfondimento per il corso di "Chimica Farmaceutica e Tossicologica II" negli anni 2012-13, 2013-14 e 2014-15; tutoraggio in Stechiometria per le Facoltà di "Ingegneria Bioenergetica", "Ingegneria Aerospaziale" ed "Ingegneria clinica" nell'anno 2013/14; Tutoraggio in Stechiometria per le Facoltà di " Ingegneria Bioenergetica", "Ingegneria Aerospaziale" ed "Ingegneria clinica" dal 01/11/2015 al 01/07/2016 lezioni di Chimica Farmaceutica nell'ambito di Master nell'anno 2015-16. E' stata titolare di un contratto per supporto alla ricerca dal 01/07/2012 al 30/07/2012 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" e, dal 01/12/2016, è PostDoc presso l'Istituto Italiano di Tecnologia (IIT) a Genova. E' co-inventore in una domanda di brevetto internazionale. I titoli della candidata rivelano il buon livello del suo profilo scientifico e la intensa attività didattica, soprattutto in considerazione della giovane età. Il profilo curriculare è congruente con il SSD oggetto del concorso e l'esperienza scientifica maturata è congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

- 1) Costi R, Crucitti GC, Pescatori L, Messori A, Scipione L, Tortorella S, Amoroso A, Crespan E, Campiglia P, Maresca B, Porta A, Granata I, Novellino E, Gouge J, Delarue M, Maga G, Di Santo R. J. Med. Chem. 2013, 56, 7431-41. *La ricerca, di interesse nel campo dei composti antitumorali e condotta con buon rigore scientifico, riguarda la progettazione, sintesi e attività biologica di nuovi composti che inibiscono un interessante bersaglio terapeutico. La ricerca è pubblicata su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 2) Costi R, Metifiot M, Esposito F, Cuzzucoli Crucitti G, Pescatori L, Messori A, Scipione L, Tortorella S, Zinzula L, Novellino E, Pommier Y, Tramontano E, Marchand C, Di Santo R. J. Med. Chem. 2013, 56, 8588-98. *L'articolo, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), riporta la sintesi e studi SAR di una serie di dichetoacidi che inibiscono sia l'attività dell'enzima integrasi che quella ribonucleasica H della trascrittasi inversa. Viene proposto un approccio multi-target nella terapia antivirale contro infezioni da HIV-1. L'approccio è interessante e lo studio è condotto con buon rigore metodologico.*
- 3) Costi R, Metifiot M, Chung S, Cuzzucoli Crucitti G, Maddali K, Pescatori L, Messori A, Madia VN, Pupo G, Scipione L, Tortorella S, Di Leva FS, Cosconati S, Marinelli L, Novellino E, Le Grice SF, Corona A, Pommier Y, Marchand C, Di Santo R. J Med Chem. 2014, 57, 3223-34. *L'articolo riporta la sintesi di composti dichetoacidi inibitori dell'integrasi di HIV-1. Viene valutata anche l'interazione con la funzione ribonucleasica H della*

trascrittasi inversa del virus HIV-1. Il lavoro, di buona qualità scientifica, è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).

4) Cuzzucoli Crucitti G, Metiflot M, Pescatori L, Messore A, Madia VN, Pupo G, Saccoliti F, Scipione L, Tortorella S, Esposito F, Corona A, Cadeddu M, Marchand C, Pommier Y, Tramontano E, Costi R, Di Santo R. J Med Chem. 2015, 58, 1915-28. *Nuovi composti dichetoacidi vengono descritti come inibitori multitarget dell'integrasi e della ribonucleasi H di HIV-1 con buona attività in cellule infettate dal virus. Lo studio denota un buon rigore metodologico ed è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1).*

5) Pescatori L, Metifiot M, Chung S, Masoaka T, Cuzzucoli Crucitti G, Messore A, Pupo G, Madia VN, Saccoliti F, Scipione L, Tortorella S, Di Leva FS, Cosconati S, Marinelli L, Novellino E, Le Grice SF, Pommier Y, Marchand C, Costi R, Di Santo R. J Med Chem. 2015, 58, 4610-23. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), descrive uno studio SAR su composti dichetoacidi in grado di differenziare le azioni contro l'attività integrasica di HIV da quelle contro la funzione ribonucleasica della trascrittasi inversa. Il lavoro è di buona qualità e condotto con rigore metodologico.*

6) Cuzzucoli Crucitti G, Pescatori L, Messore A, Madia VN, Pupo G, Saccoliti F, Scipione L, Tortorella S, Di Leva FS, Cosconati S, Novellino E, Debyser Z, Christ F, Costi R, Di Santo R. Eur J Med Chem. 2015, 101, 288-94. *Una classe di composti N-aril-naftilamminici viene riproposta per l'attività inibitrice nei confronti dell'interazione proteina-proteina dell'enzima integrasi dell'HIV-1 con la proteina LEDGF umana. Il lavoro è di buona qualità e pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

7) Das KK, Razzaghi-Asl N, Tikare SN, Di Santo R, Costi R, Messore A, Pescatori L, Crucitti GC, Jargar JG, Dhundasi SA, Saso L. J Enz. Inhib. Med. Chem. 2016, 31, 99-105. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), è dedicato allo studio dell'attività ipoglicemizzante di alcuni composti analoghi della curcumina, con dati di attività in vivo. Il lavoro è originale e condotto con rigore metodologico.*

8) Madia VN, Benedetti R, Barreca ML, Ngo L, Pescatori L, Messore A, Pupo G, Saccoliti F, Valente S, Mai A, Scipione L, Zheng YG, Tintori C, Sotta M, Cecchetti V, Altucci L, Di Santo R, Costi R. ChemMedChem. 2017, 12, 1359-1368. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di buon livello (Q2), riporta la sintesi di derivati cinnamici inibitori della istone acetiltransferasi p300. Lo studio appare originale e riporta risultati rilevanti dal punto di vista scientifico.*

9) Saccoliti F, Angiulli G, Pupo G, Pescatori L, Madia VN, Messore A, Colotti G, Fiorillo A, Scipione L, Gramiccia M, Di Muccio T, Di Santo R, Costi R, Ilari A. J Enz. Inhib. Med. Chem. 2017, 32, 304-310. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), riporta la scoperta di un nuovo inibitore della tripanotione reduttasi di Leishmania infantum, con dati strutturalistici e caratterizzazione biochimica. Lo studio, condotto con buon rigore metodologico, riporta risultati di rilievo per lo sviluppo di nuovi antiprotozoari.*

10) Basilicata MG, Pepe G, Adesso S, Ostacolo C, Sala M, Sommella E, Scala MC, Messore A, Autore G, Marzocco S, Campiglia P. Int. J. Mol. Sci. 2018, 19. pii: E1955. *Il lavoro descrive le proprietà antiossidanti di prodotti di latticini, che potrebbero avere un impatto sulla salute ed una rilevanza nutraceutica. Il lavoro, condotto con rigore metodologico, è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 - multidisciplinare).*

11) Saccoliti F, Madia VN, Tudino V, De Leo A, Pescatori L, Messore A, De Vita D., Scipione L, Brun R, Kaiser M, Maser P, Magalhaes Calvet C, K. Jennings G, M. Podust L, Costi R, Di Santo R. Eur. J. Med. Chem. 2018, 156, 53-60. *L'articolo, pubblicato in una rivista di ottimo livello (Q1), riporta l'attività antiprotozoaria di alcuni antifungini azolici. Il lavoro, condotto con rigore metodologico, porta a risultati rilevanti nel settore dei farmaci antitripanosomiaci.*

Titolo: Quinolinonyl derivatives as anti-HIV agents. La tesi descrive la sintesi ed analisi SAR di derivati chinolonici studiati come potenziali agenti anti-HIV attivi contro l'integrasi e la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa. La tesi appare sviluppata con buon rigore scientifico e metodologico, e riporta ricerche interessanti e congruenti con il settore.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La candidata MESSORE presenta 11 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS, su riviste con Impact Factor, una domanda di brevetto, una tesi di Dottorato e 18 poster a congressi.

Valutazione sulla produzione complessiva

La candidata MESSORE presenta pubblicazioni originali, ricerche condotte con buon rigore metodologico e risultati di rilevanza nell'ambito del panorama scientifico internazionale. La produzione, riportata su riviste a diffusione internazionale spesso di ottima collocazione editoriale, è congruente con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. Complessivamente la produzione scientifica è buona e continua nel tempo. Per le 11 pubblicazioni presentate la candidata dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 6$; Citazioni totali = 112; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 10,18; IF Totale (11 pubblicazioni) = 49,912; IF Medio: 4,52. Il nome della candidata è presente come primo nome in una pubblicazione nella quale l'apporto individuale è facilmente enucleabile. La candidata ha presentato i propri risultati scientifici in 18 presentazioni poster a congressi. La candidata mostra di aver raggiunto un buon livello scientifico nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08. L'esperienza scientifica maturata della candidata è congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

GIUDIZIO COLLEGALE

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2016.
2. Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2012 conseguita presso l'Università di Roma "La Sapienza".
3. Assistenza ad esercitazioni di laboratorio per il corso di "Analisi Chimico Farmaceutica e Tossicologica II" presso l'Università di Roma "La Sapienza" AA 2012/13, 2013/14.
4. Lezioni di approfondimento per il corso di "Chimica Farmaceutica e Tossicologica II" presso l'Università di Roma "La Sapienza" AA 2012/13, 2013/14, 2014/15.
5. Tutoraggio in Stechiometria per le Facoltà di " Ingegneria Bioenergetica", "Ingegneria Aerospaziale" ed "Ingegneria clinica" presso l'Università Roma "La Sapienza" dal AA 2013/14.
6. Tutoraggio in Stechiometria per le Facoltà di " Ingegneria Bioenergetica", "Ingegneria Aerospaziale" ed "Ingegneria clinica" presso l'Università Roma "La Sapienza" dal 01/11/2015 al 01/07/2016.
7. Lezioni di Chimica Farmaceutica nell'ambito del "Master di II livello in nutraceutica e cosmetica di prodotti di origine vegetale" presso l'Università degli Studi Roma "La Sapienza" AA 2015/16.
8. Contratto di ricerca occasionale presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza", dal 01/07/2012 al 30/07/2012.
9. Borsa PostDoc presso l'Istituto Italiano di Tecnologia (IIT) Genova dal 01/12/2016-oggi.
10. Domanda di brevetto internazionale Application Number EP17163014 (2017).

11.18 comunicazioni poster a congressi.

Valutazione sui titoli

La candidata MESSORE ha conseguito la Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2012 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" e nel 2016 il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche presso il medesimo Ateneo. L'attività didattica e di ricerca svolte successivamente sono di buon livello e congruenti con il SSD oggetto del concorso. E' coinventore in una domanda di brevetto internazionale e titolare di 18 poster a Congresso. L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata evidenzia un profilo curriculare di buon livello, sia per quanto riguarda la continuità temporale dell'attività di ricerca svolta, che per l'attività didattica. L'esperienza scientifica maturata della candidata è congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1) Costi R, Crucitti GC, Pescatori L, Messore A, Scipione L, Tortorella S, Amoroso A, Crespan E, Campiglia P, Maresca B, Porta A, Granata I, Novellino E, Gouge J, Delarue M, Maga G, Di Santo R. J. Med. Chem. 2013, 56, 7431-41. *Nuovi composti non nucleosidici a struttura dichetoacida sono riportati come inibitori della teminal desossinucleotidil trasferasi umana. Vengono descritte la progettazione sintesi, attività biologica e studi strutturalistici che delineano le interazioni tra tali inibitori ed il target biologico. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1). La ricerca descritta denota rigore metodologico ed è di grande interesse nel campo dei prodotti antitumorali.*

2) Costi R, Metifiot M, Esposito F, Cuzzucoli Crucitti G, Pescatori L, Messore A, Scipione L, Tortorella S, Zinzula L, Novellino E, Pommier Y, Tramontano E, Marchand C, Di Santo R. J. Med. Chem. 2013, 56, 8588-98. *Il lavoro descrive una serie di pirrolidichetoacidi che inibiscono sia l'integrasi che la ribonucleasi H della trascrittasi inversa di HIV-1. Viene proposto un approccio multi-target nella terapia anti-HIV-1, approccio molto innovativo e rilevante nel settore degli antiretrovirali. Lo studio è condotto con grande rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

3) Costi R, Metifiot M, Chung S, Cuzzucoli Crucitti G, Maddali K, Pescatori L, Messore A, Madia VN, Pupo G, Scipione L, Tortorella S, Di Leva FS, Cosconati S, Marinelli L, Novellino E, Le Grice SF, Corona A, Pommier Y, Marchand C, Di Santo R. J Med Chem. 2014, 57, 3223-34. *La pubblicazione descrive la progettazione e sintesi di composti chinolonidichetoacidi caratterizzati da un sostituito amminico, come inibitori dell'integrasi di HIV-1. I composti sono ben caratterizzati sia da un punto di vista chimico che delle proprietà farmacologiche e infatti sono anche studiati per valutare l'interazione con un altro target virale, la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa dell'HIV-1. Il lavoro è molto ben condotto ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

4) Cuzzucoli Crucitti G, Metiflot M, Pescatori L, Messore A, Madia VN, Pupo G, Saccoliti F, Scipione L, Tortorella S, Esposito F, Corona A, Cadeddu M, Marchand C, Pommier Y, Tramontano E, Costi R, Di Santo R. J Med Chem. 2015, 58, 1915-28. *Nella pubblicazione in oggetto sono presentati composti pirrolidichetoacidi che risultano inibitori duali dell'integrasi e della ribonucleasi H di HIV-1. E' riportato uno studio SAR e i composti mostrano anche un'ottima attività in cellula infettata dal virus. Tale studio è molto rilevante soprattutto per l'aspetto di novità dell'approccio multi-target nel campo dell'HIV-1. E' condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1).*

5) Pescatori L, Metifiot M, Chung S, Masoaka T, Cuzzucoli Crucitti G, Messore A, Pupo G, Madia VN, Saccoliti F, Scipione L, Tortorella S, Di Leva FS, Cosconati S, Marinelli L, Novellino E, Le Grice SF, Pommier Y, Marchand C, Costi R, Di Santo R. J Med Chem. 2015, 58, 4610-23. *Nel lavoro è riportato uno studio SAR su composti chinolinonil dichetoacidi: sono definiti i requisiti strutturali per indirizzare l'azione inibitrice contro*

l'enzima integrasi di HIV, anziché contro la funzione ribonucleasica della trascrittasi inversa. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), è ben condotto e realizzato.

6) Cuzzucoli Crucitti G, Pescatori L, Messore A, Madia VN, Pupo G, Saccoliti F, Scipione L, Tortorella S, Di Leva FS, Cosconati S, Novellino E, Debyser Z, Christ F, Costi R, Di Santo R. Eur J Med Chem. 2015, 101, 288-94. *Il lavoro descrive la scoperta di una classe di composti a struttura N-aril-naftilamminica che vengono riposizionati come composti ad attività inibitrice nei confronti dell'interazione proteina-proteina integrasi dell'HIV-1/LEDGF umana. Il lavoro è molto originale e ben condotto. E' stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

7) Das KK, Razzaghi-Asl N, Tikare SN, Di Santo R, Costi R, Messore A, Pescatori L, Crucitti GC, Jargar JG, Dhundasi SA, Saso L. J Enz. Inhib. Med. Chem. 2016, 31, 99-105. *Alcuni composti a struttura curcuminoide sono riportati come agenti ipoglicemizzanti. Tali composti mostrano anche azione in modelli murini in esperimenti condotti in vivo. Il lavoro porta interessanti avanzamenti nel settore è condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

8) Madia VN, Benedetti R, Barreca ML, Ngo L, Pescatori L, Messore A, Pupo G, Saccoliti F, Valente S, Mai A, Scipione L, Zheng YG, Tintori C, Sotta M, Cecchetti V, Altucci L, Di Santo R, Costi R. ChemMedChem. 2017, 12, 1359-1368. *Nel lavoro viene riportata una serie di composti a struttura base cinnamoilica in grado di inibire un target epigenetico: l'istone acetil transferasi p300. Lo studio descrive le SAR in questa classe di composti, è condotto con rigore metodologico e porta interessanti avanzamenti in questo settore di indagine. E' pubblicato su una rivista di buon livello (Q2).*

9) Saccoliti F, Angiulli G, Pupo G, Pescatori L, Madia VN, Messore A, Colotti G, Fiorillo A, Scipione L, Gramiccia M, Di Muccio T, Di Santo R, Costi R, Ilari A. J Enz. Inhib. Med. Chem. 2017, 32, 304-310. *Il lavoro descrive la scoperta di un composto a struttura diarilsulfurea che è in grado di inibire la tripanotione reduttasi di Leishmania infantum. Il composto e l'inibizione di tale composto è ben definita da un punto di vista biochimico. Sono riportati studi strutturalistici che permetteranno una progettazione razionale di nuovi composti in grado di interagire efficacemente con questo target. Il lavoro denota grande rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

10) Basilicata MG, Pepe G, Adesso S, Ostacolo C, Sala M, Sommella E, Scala MC, Messore A, Autore G, Marzocco S, Campiglia P. Int. J. Mol. Sci. 2018, 19, pii: E1955. *Il lavoro descrive le proprietà antiossidanti di prodotti di latticini a base di latte di bufala. In particolare è descritta l'azione di un peptide rilasciato dopo la GI di ricotta di bufala che riduce lo stress ossidativo in cellule epiteliali intestinali. Il lavoro, pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 - multidisciplinare), è condotto con rigore metodologico e apporta interessanti avanzamenti nell'ambito alimentare.*

11) Saccoliti F, Madia VN, Tudino V, De Leo A, Pescatori L, Messore A, De Vita D., Scipione L, Brun R, Kaiser M, Maser P, Magalhaes Calvet C, K. Jennings G, M. Podust L, Costi R, Di Santo R. Eur. J. Med. Chem. 2018, 156, 53-60. *Il lavoro descrive il riposizionamento di alcuni agenti antifungini azolici nel campo dei composti ad azione antiprotozoaria. Tali azoli risultano efficaci anche in modelli murini di infezione acuta da T. cruzi, in modo paragonabile al farmaco utilizzato attualmente in terapia e usato come riferimento. Il lavoro è ben strutturato e molto rilevante nel settore dei farmaci antitripanosomiaci. E' pubblicato in una rivista di ottimo livello (Q1).*

TESI DOTTORATO

Titolo: Quinolinonyl derivatives as anti-HIV agents. La tesi descrive la sintesi e le SAR di derivati chinolonici studiati come potenziali agenti anti-HIV attivi contro l'integrasi e la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa. La progettazione la sintesi e lo studio

dell'azione contro i singoli target e contro le cellule infettate dall'HIV-1 sono affrontate con rigore scientifico e metodologico. I contenuti delle ricerche sono di grande interesse nel settore.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La candidata MESSORE presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 11 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, 1 domanda di brevetto, tesi Dottorato, 18 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

La candidata MESSORE presenta pubblicazioni originali, innovative e nelle quali si denota rigore metodologico. Esse hanno ottima rilevanza nell'ambito del panorama scientifico internazionale e coprono tematiche congruenti con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. La produzione globalmente è quantificabile in 12 pubblicazioni, 1 tesi di dottorato, 1 domanda di brevetto. Per le 11 pubblicazioni presentate la candidata dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 6$; Citazioni totali = 112; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 10,18; IF Totale (11 pubblicazioni) = 49,912; IF Medio: 4,52. Inoltre la candidata ha presentato i propri risultati scientifici in 18 presentazioni poster a Congressi. La produzione scientifica è globalmente buona, continua nel tempo e riportata su riviste a diffusione internazionale prevalentemente di ottima collocazione editoriale. L'apporto individuale è facilmente enucleabile in una pubblicazione nella quale la candidata è riportata come primo nome. Comunque, tenuto conto anche dell'attività scientifica globale sviluppata dalla candidata stessa, la Commissione ritiene che vi siano evidenti elementi di giudizio per individuare il suo apporto alla progettazione e sintesi anche nelle pubblicazioni dove non è in evidenza. La candidata ha raggiunto pertanto un buon livello scientifico nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08. L'esperienza scientifica maturata è congruente con le linee di ricerca indicate nel bando.

CANDIDATO: PANDOLFI FABIANA

COMMISSARIO 1

Prof. Roberto Di Santo

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2017.
2. Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2013.
3. Assegno di ricerca, presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01/04/2018 ad oggi.
4. Borsa di studio Presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria, dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01/01/2017 al 31/03/2018.
5. Comunicazioni a Congressi: 5 presentazioni poster.

Valutazione dei titoli

La candidata PANDOLFI ha conseguito la Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2013 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" e nel 2017 il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche presso il medesimo Ateneo difendendo una tesi dal titolo: New anti-biofilm agents and cholinesterase inhibitors from a common scaffold: design, synthesis and biological evaluation. Ha avuto una borsa di studio per attività di

ricerca presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria, alla "Sapienza" Università di Roma dal 01/01/2017 al 31/03/2018 e successivamente un assegno di ricerca, presso lo stesso Dipartimento, dal 01/04/2018 ad oggi. La candidata ha presentato 5 comunicazioni poster a Congressi. L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata mette in luce un profilo curricolare di buon livello, per quanto riguarda la continuità temporale dell'attività di ricerca svolta, parzialmente congruente con il SSD oggetto del concorso e con le tematiche indicate dal bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

- 1) F. Pandolfi, L. Mattiello, D. Zane, M. Feroci. *Electrochim. Acta* (2018) 280, 71-76// *lavoro descrive il comportamento elettrochimico della 9-metilcaffeina ioduro. Tale comportamento è stato studiato mediante voltammetria ciclica, voltammetria a impulsi differenziali ed elettrolisi. La riduzione catodica ha prodotto un carbene che per idratazione genera un metabolita di una spugna: l'imeniacidina. Il lavoro è condotto con rigore metodologico e ha notevole rilevanza nell'ambito dell'elettrochimica. Pubblicato su una rivista di buon livello in ambito elettrochimico (Q1 - Elettrochimica)*
- 2) V. Poongavanam, A. Corona, C. Svendsen, L. Scipione, N. Grandi, F. Pandolfi, R. Di Santo, R. Costi, F. Esposito, E. Tramontano, J. Kongsted. *MedChemComm* (2018), 9, 562-575. *Il lavoro riporta uno studio in silico sull'identificazione di nuovi composti inibitori della RNasi H dell'HIV-1 descrivendo uno screening structure-guided accoppiato con una similarity-based search utilizzando come database Specs. Inoltre gli studi di mutagenesi sito-diretti forniscono informazioni preziose sulla modalità di legame dei composti identificati. Le informazioni strutturali ottenute da questo lavoro possono rappresentare una base importante per una futura lead optimization. Il lavoro è condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di medio livello (Q3).*
- 3) F. Pandolfi, D. De Vita, M. Bortolami, A. Coluccia, R. Di Santo, R. Costi, V. Andrisano, F. Alabiso, C. Bergamini, R. Fato, M. Bartolini, L. Scipione. *Eur. J. Med. Chem.* (2017), 141, 197-210. *Il lavoro riporta la progettazione e la sintesi di una serie di piridine che presentano una funzione carbammica o ammidica come inibitori dell'acetilcolinesterasi. Viene riportato anche lo studio di docking molecolare e di alcuni derivati anche l'attività di inibizione della aggregazione dell'amilode. Il lavoro è ben strutturato e pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 4) F. Pandolfi, I. Chiarotto, D. Rocco, M. Feroci. *Electrochim Acta* (2017), 254, 358-367. *Electrochim. Acta* (2017), 254, 358-367. *Questo lavoro riporta che le benzammidi possono essere ottenute a partire dalla deossi-benzoina e dal benzile, attraverso la scissione del legame C-C, con rese che dipendono dalla quantità di carica. Viene riportata un'ipotesi meccanicistica che consente di spiegare la formazione di sottoprodotti e di definire il ruolo dell'ossigeno e dell'anione superossido. Il lavoro è condotto con rigore metodologico e pubblicato su una rivista di ottimo impatto (Q1 - Elettrochimica)*
- 5) D. De Vita, A. Angeli, F. Pandolfi, M. Bortolami, R. Costi, R. Di Santo, E. Suffredini, M. Ceruso, S. Del Prete, C. Capasso, L. Scipione, C. T. Supuran. *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* (2017), 32, 798-804. *Il lavoro descrive la scoperta di nuove ammidi e solfonammidi come inibitori dell'anidraasi carbonica del Vibrio Cholerae. Il lavoro è molto interessante perché propone un target alternativo per combattere il Vibrione e i batteri in generale. Il lavoro è condotto con buon rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 6) D. De Vita, G. Simonetti, F. Pandolfi, R. Costi, R. Di Santo, F.D. D'Auria, L. Scipione *Bioorg. Med.Chem. Lett.* (2016), 26, 5931-5935. *Il lavoro descrive la sintesi di alcuni esteri e ammidi cinnamoiliche attive nei confronti del biofilm in formazione di Candida Albicans. Il lavoro è ben condotto e risulta importante per l'emergente problema della formazione di biofilm fungini ed è pubblicato su una rivista di buon livello (Q3).*

- 7) D. De Vita, F. Pandolfi, L. Omano, M. Feroci, I. Chiarotto, I. Sileno, F. Pepi, R. Costi, R. Di Santo, L. Scipione. *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* (2016), 31, 106-113. *Il lavoro presenta la sintesi e l'attività inibitoria nei confronti dell'acetilcolinesterasi di una serie di N,N-dimetilcarbammati contenenti un gruppo N,N-dibenzilamminico. Inoltre, sono state delineate alcune regole SAR di base. Il lavoro è condotto con buon rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 8) D. De Vita, F. Pandolfi, R. Cirilli, L. Scipione, R. Di Santo, L. Friggeri, M. Mori, D. Fiorucci, G. Maccari, R. S. Arul Christopher, C. Zamperini, V. Pau, A. De Logu, S. Tortorella, M. Botta. *Eur. J. Med. Chem.* (2016), 121, 169-180. *In questo lavoro è riportato uno screening di un set di derivati azolici nei confronti di protozoi patologici. E' inoltre riportato uno studio di docking molecolare per definire l'interazione tra tali inibitori e il target molecolare. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 9) D. De Vita, F. Moraca, C. Zamperini, F. Pandolfi, R. Di Santo, A. Matheeussen, L. Maes, S. Tortorella, L. Scipione. *Eur. J. Med. Chem.* (2016), 113, 28-33. *La pubblicazione descrive un ligand based approach per l'individuazione di composti attivi nei confronti del Mycobacterium Tuberculosis. Le molecole sono state selezionate a partire da due banche dati pubbliche e da una library in-house. Il lavoro è condotto con rigore metodologico e ha notevole rilevanza nell'ambito dei composti che possono essere utili a combattere la tubercolosi. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 10) L. Friggeri, D. De Vita, F. Pandolfi, S. Tortorella, R. Costi, R. Di Santo, L. Scipione. *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* (2015), 30, 166-172. *Il lavoro descrive la progettazione sintesi e valutazione biologica di derivati dell'acido 3,4-diidrossibenzoico che mostrano azione chelante nei confronti di metalli importanti da un punto di vista biologico e azione inibitrice nei confronti dell'acetilcolinesterasi. Per questo motivo essi possono avere interesse nell'ambito di patologie neurodegenerative. Il lavoro è condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 11) D. De Vita, L. Friggeri, F. D. D'Auria, F. Pandolfi, F. Piccoli, S. Panella, A. T. Palamara, G. Simonetti, L. Scipione, R. Di Santo, R. Costi, S. Tortorella. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* (2014), 24, 1502-1505. *Il lavoro descrive l'attività inibitrice nei confronti del biofilm fungino di Candida albicans dell'acido caffeico e di alcuni suoi derivati esterei. E' condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di medio livello (Q3).*
- 12) F. Moraca, D. De Vita, F. Pandolfi, R. Di Santo, R. Costi, R. Cirilli, F. D. D'Auria, S. Panella, A. T. Palamara, G. Simonetti, M. Botta, L. Scipione. *Eur. J. Med. Chem.* (2014), 83, 665-673. *In questo lavoro viene descritta una nuova serie di derivati 2-(1H-imidazol-1-il)-1-feniletanolic. Si riporta l'attività antifungina in vitro contro diverse specie fungine. I risultati biologici mostrano che i composti più attivi possiedono un'attività antifungina comparabile o superiore a quella del fluconazolo nei confronti di Candida albicans, Cryptococcus neoformans e Dermatofiti. A causa della loro natura racemica, i composti più attivi sono stati separati e sono testati come enantiomeri puri. Per razionalizzare i dati sperimentali, è stato condotto uno studio computazionale ligand-based. Il lavoro è condotto con buon rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La candidata PANDOLFI presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor e 5 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

La candidata PANDOLFI presenta pubblicazioni originali, innovative e nelle quali si denota rigore metodologico e di ottima rilevanza nell'ambito del panorama scientifico internazionale. La produzione è quasi interamente congruente con il SSD CHIM/08 per il

quale è bandita la procedura. La produzione scientifica è globalmente buona, continua nel tempo e riportata su riviste a diffusione internazionale dotate di media o ottima collocazione editoriale e diffusione all'interno della comunità scientifica. La produzione globalmente è quantificabile in 15 pubblicazioni. Per le 15 pubblicazioni la candidata dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 5$; Citazioni totali = 66; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 4,4, IF Totale (15 pubblicazioni) = 53,86; IF Medio: 3,59. L'apporto individuale è facilmente enucleabile nelle 3 pubblicazioni nelle quali risulta come primo autore, di cui 2 sono non pertinenti con le tematiche del SSD oggetto del presente bando. La candidata ha presentato i propri risultati scientifici in 5 presentazioni poster a Congressi e ha ottenuto un finanziamento "Avvio alla Ricerca 2016", presso Sapienza, Università di Roma. La candidata ha raggiunto pertanto un buon livello scientifico nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08 e buona esperienza sulle linee di ricerca indicate nel bando. Comunque nell'ultimo periodo, come dimostrano le pubblicazioni presentate, si delinea un'attività di ricerca in settore non congruente con quello richiesto nel bando.

COMMISSARIO 2

Prof. Pietro Campiglia

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2017.
2. Laurea in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2013. E
3. Assegno di ricerca, presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01/04/2018 ad oggi.
4. Borsa di studio Presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria, dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01/01/2017 al 31/03/2018.
5. Comunicazioni a Congressi: 5 presentazioni poster.

Valutazione sui titoli

La candidata Pandolfi ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche presso l'Università degli studi di Roma "La Sapienza nel 2017, apparentemente trattando argomenti di ricerca che risultano inerenti il SSD oggetto del presente concorso, anche se non è stato possibile valutarne la consistenza per mancanza del manoscritto originale della Tesi di Dottorato. Le attività successive al dottorato, rappresentate da contratti di ricerca, non sembrano presentare particolare congruenza con il SSD oggetto del presente concorso e con le tematiche del bando. La candidata dichiara 5 poster a Congresso. Il giudizio in merito ai titoli presentati è sufficiente.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1) F. Pandolfi, L. Mattiello, D. Zane, M. Feroci. *Electrochim. Acta* (2018) 280, 71-76. *Il lavoro descrive il comportamento elettrochimico della 9-metilcaffeina ioduro che mediante voltammetria ciclica, voltammetria a impulsi differenziali ed elettrolisi è trasformata in un intermedio sottoforma di carbene, il quale per idratazione produce l'imeniacidina. Il lavoro è condotto con notevole rigore metodologico e può essere considerato rilevante nell'ambito scientifico di riferimento, benchè poco attinente le tematiche relative all'SSD del presente concorso. Pubblicato su una rivista di ottimo livello in ambito elettrochimico (Q1 - Elettrochimica).*

2) V. Poongavanam, A. Corona, C. Svendsen, L. Scipione, N. Grandi, F. Pandolfi, R. Di Santo, R. Costi, F. Esposito, E. Tramontano, J. Kongsted. *MedChemComm* (2018), 9,

562-575. *Il lavoro è incentrato su uno studio di modellistica molecolare per l'identificazione di nuovi composti inibitori della RNasi H dell'HIV-1, mediante uno screening structure-guided accoppiato con una similarity-based search. Le evidenze derivanti dall'approccio in silico sono corroborate da studi di mutagenesi sito-diretti garantendo l'identificazione delle modalità di legame dei composti al bersaglio. Il lavoro rappresenta un notevole avanzamento nell'ambito scientifico di riferimento, è caratterizzato da originalità e rigore metodologico. E' pubblicato su una rivista di medio livello (Q3).*

3) F. Pandolfi, D. De Vita, M. Bortolami, A. Coluccia, R. Di Santo, R. Costi, V. Andrisano, F. Alabiso, C. Bergamini, R. Fato, M. Bartolini, L. Scipione. Eur. J. Med. Chem. (2017), 141, 197-210. *Il lavoro descrive il design e la sintesi di una serie di derivati piridinici inibitori dell'acetilcolinesterasi in grado di inibire l'aggregazione amiloide. Il lavoro è svolto con l'ausilio di metodi in silico. Il lavoro è ben strutturato, scientificamente valido e pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

4) F. Pandolfi, I. Chiarotto, D. Rocco, M. Feroci. Electrochim. Acta (2017), 254, 358-367. *Questa pubblicazione descrive la sintesi di benzammidi a partire dalla deossi-benzoina e dal benzile, mediante amidazione ossidativa. Il lavoro è corredato da un'ipotesi meccanicistica in grado di definire il ruolo dell'ossigeno e dell'anione superossido nella meccanismo di reazione. Il lavoro è condotto con rigore metodologico e pubblicato su una rivista di ottimo impatto benchè non affine alle tematiche inerenti il SSD di riferimento per il presente concorso (Q1 - Elettrochimica).*

5) D. De Vita, A. Angeli, F. Pandolfi, M. Bortolami, R. Costi, R. Di Santo, E. Suffredini, M. Ceruso, S. Del Prete, C. Capasso, L. Scipione, C. T. Supuran. J. Enz. Inhib. Med. Chem. (2017), 32, 798-804. *Il lavoro è basato sull'identificazione di nuove molecole di natura amidica e solfonamidica inibitori di un sottotipo recettoriale dell'anidrasi carbonica caratteristica del Vibrio Cholerae. Il lavoro è molto interessante perché definisce una strategia innovativa per il trattamento farmacologico del patogeno. E' condotto con buon rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

6) D. De Vita, G. Simonetti, F. Pandolfi, R. Costi, R. Di Santo, F.D. D'Auria, L. Scipione Bioorg. Med. Chem. Lett. (2016), 26, 5931-5935. *Il lavoro è pubblicato su di una rivista di medio livello (Q3) e descrive l'attività anti-candida di derivati dell'acido cinnamico tramite l'opposizione alla formazione di biofilm. La ricerca è ben condotta ed i risultati di sufficiente rilevanza per l'ambito scientifico di riferimento.*

7) D. De Vita, F. Pandolfi, L. Omano, M. Feroci, I. Chiarotto, I. Sileno, F. Pepi, R. Costi, R. Di Santo, L. Scipione. J. Enz. Inhib. Med. Chem. (2016), 31, 106-113. *Il lavoro descrive la sintesi di N,N-dimetilcarbammati e l'attività inibitoria da essi svolta nei confronti dell'acetilcolinesterasi. Lo studio è arricchito da elementi di relazione struttura-attività. Il lavoro è scientificamente valido, condotto con buon rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

8) D. De Vita, F. Pandolfi, R. Cirilli, L. Scipione, R. Di Santo, L. Friggeri, M. Mori, D. Fiorucci, G. Maccari, R. S. Arul Christopher, C. Zamperini, V. Pau, A. De Logu, S. Tortorella, M. Botta. Eur. J. Med. Chem. (2016) 121, 169-180 *In questo lavoro sono sviluppati potenziali antiprotozoi a nucleo azolico. Lo studio comprende una parte in silico di docking molecolare atta a definire le principali interazioni farmaco-recettoriali rilevate. Il lavoro è caratterizzato da buona originalità e rigore metodologico. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

9) D. De Vita, F. Moraca, C. Zamperini, F. Pandolfi, R. Di Santo, A. Matheussen, L. Maes, S. Tortorella, L. Scipione. Eur. J. Med. Chem. (2016) 113, 28-33. *In questo lavoro, tramite un approccio ligand-based che sfrutta due data bank ed una libreria molecolare in-house, sono individuati una serie di derivati attivi nei confronti del Mycobacterium Tuberculosis. Il lavoro è condotto con rigore metodologico e ha assoluta rilevanza nell'ambito dei composti antitubercolari. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

10) L. Friggeri, D. De Vita, F. Pandolfi, S. Tortorella, R. Costi, R. Di Santo, L. Scipione. J. Enz. Inhib. Med. Chem. (2015), 30, 166-172. *La pubblicazione è incentrata sul design, la sintesi e la valutazione biologica di derivati dell'acido 3,4-diidrossibenzoico con azione chelante nei confronti di metalli e inibitori dell'acetilcolinestasi, con possibile impiego nelle patologie neurodegenerative. Il lavoro è di buon livello, condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di primo piano (Q1).*

11) D. De Vita, L. Friggeri, F. D. D'Auria, F. Pandolfi, F. Piccoli, S. Panella, A. T. Palamara, G. Simonetti, L. Scipione, R. Di Santo, R. Costi, S. Tortorella. Bioorg. Med. Chem. Lett. (2014), 24,1502-1505. *Il lavoro è pubblicato su di una rivista di medio livello (Q3) e descrive l'attività anti-candida di derivati dell'acido caffeico tramite l'opposizione alla formazione di biofilm. La ricerca è ben condotta ed i risultati di sufficiente rilevanza per l'ambito scientifico di riferimento.*

12) F. Moraca, D. De Vita, F. Pandolfi, R. Di Santo, R. Costi, R. Cirilli, F. D. D'Auria, S. Panella, A. T. Palamara, G. Simonetti, M. Botta, L. Scipione. Eur. J. Med. Chem. (2014), 83, 665-673. *Una serie di derivati imidazolici è descritta relativamente alla loro attività antifungina in vitro.. Il lavoro è corredato da studi di selettività enantiomerica. I risultati dello studio sono razionalizzati mediante approccio in silico. Il lavoro è condotto con buon rigore metodologico, ha rilevanza scientifica notevole ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La candidata PANDOLFI presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor e 5 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

La candidata PANDOLFI ha presentato a valutazione numero 12 pubblicazioni, su riviste a diffusione internazionale dotate di buona collocazione editoriale. In 3 di queste pubblicazioni risulta primo autore, benchè 2 di esse riguardino tematiche non attinenti il SSD di riferimento per il presente concorso, mentre 2 presentano co-autori internazionali. La produzione scientifica è stata continua nell'arco temporale considerato anche se non sempre attinente alle tematiche inerenti il SSD di riferimento per il presente concorso. Lo stesso dicasi per i poster presentati a congresso. Le pubblicazioni presentate evidenziano che la candidata ha maturato sufficiente esperienza e competenze in ambito scientifico anche se non sempre attinenti alle tematiche richieste nel bando del presente concorso. La produzione globalmente è quantificabile in 15 pubblicazioni. Per le 15 pubblicazioni la candidata dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 5$; Citazioni totali = 66; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 4,4, IF Totale (15 pubblicazioni) = 53,86; IF Medio: 3,59. La candidata ha raggiunto un buon livello nel campo della ricerca scientifica su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08, benchè, soprattutto nell'ultimo periodo, si delinea un'attività di ricerca non congruente con quella richiesta nel bando.

COMMISSARIO 3

Prof.ssa Silvia Rivara

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2017.
2. Laurea in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2013. E

3. Assegno di ricerca, presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01/04/2018 ad oggi.
4. Borsa di studio Presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria, dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01/01/2017 al 31/03/2018.
5. Comunicazioni a Congressi: 5 presentazioni poster.

Valutazione sui titoli

La candidata PANDOLFI ha conseguito la Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2013 e il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche nel 2017 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con una tesi dal titolo: *New anti-biofilm agents and cholinesterase inhibitors from a common scaffold: design, synthesis and biological evaluation*. E' stata titolare di una borsa di studio per attività di ricerca presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria, all'Università degli Studi "La Sapienza" dal 01/01/2017 al 31/03/2018 e dal 01/04/2018 ad oggi è titolare di un assegno di ricerca presso lo stesso Dipartimento. Oltre alle pubblicazioni, la candidata ha presentato 5 comunicazioni poster a congressi. L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata rivela una buona continuità temporale e un buon profilo curriculare parzialmente congruente con il SSD oggetto del concorso e con le tematiche indicate nel bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

- 1) F. Pandolfi, L. Mattiello, D. Zane, M. Feroci. *Electrochim. Acta* (2018) 280, 71-76. *Il lavoro descrive una investigazione condotta tramite voltammetria ciclica, voltammetria ad impulsi differenziali ed elettrolisi, che porta alla sintesi di un metabolita marino. Il lavoro, pubblicato su una rivista di buon livello in ambito elettrochimico (Q1 - Elettrochimica), ha parziale rilevanza in ambito farmaceutico.*
- 2) V. Poongavanam, A. Corona, C. Svendsen, L. Scipione, N. Grandi, F. Pandolfi, R. Di Santo, R. Costi, F. Esposito, E. Tramontano, J. Kongsted. *MedChemComm* (2018), 9, 562-575. *L'articolo pubblicato su una rivista di medio livello (Q3), riporta l'identificazione di nuovi inibitori della RNasi H dell'HIV-1 condotta tramite virtual screening. Studi di mutagenesi vengono condotti per chiarire la modalità di legame dei composti. Il lavoro è condotto con rigore metodologico.*
- 3) F. Pandolfi, D. De Vita, M. Bortolami, A. Coluccia, R. Di Santo, R. Costi, V. Andrisano, F. Alabiso, C. Bergamini, R. Fato, M. Bartolini, L. Scipione. *Eur. J. Med. Chem.* (2017), 141, 197-210. *L'articolo, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), descrive la sintesi di una serie di inibitori dell'acetilcolinesterasi con attività di inibizione della aggregazione dell'amiloide. Uno studio di docking molecolare chiarisce l'interazione inibitore-bersaglio. Il lavoro è originale e condotto con buon rigore metodologico.*
- 4) F. Pandolfi, I. Chiarotto, D. Rocco, M. Feroci. *Electrochim Acta* (2017), 254, 358-367. *Electrochim. Acta* (2017), 254, 358-367. *L'articolo, dedicato alla sintesi di benzammidi, chiarisce il ruolo dell'ossigeno e dell'anione superossido nella reazione e spiega la formazione dei prodotti. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo impatto (Q1 - Elettrochimica) nel campo dell'elettrochimica.*
- 5) D. De Vita, A. Angeli, F. Pandolfi, M. Bortolami, R. Costi, R. Di Santo, E. Suffredini, M. Ceruso, S. Del Prete, C. Capasso, L. Scipione, C. T. Supuran. *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* (2017), 32, 798-804 *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1) descrive la preparazione di derivati amidici e solfonamidici come inibitori selettivi dell'anidrasi carbonica del batterio Vibrio Cholerae. Il lavoro, originale, risulta di significativo impatto presentando nuovi potenti lead compounds.*
- 6) D. De Vita, G. Simonetti, F. Pandolfi, R. Costi, R. Di Santo, F.D. D'Auria, L. Scipione *Bioorg. Med.Chem. Lett.* (2016), 26, 5931-5935. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di medio livello (Q3), riporta la valutazione di nuovi potenziali agenti antifungini e descrive la*

sintesi di esteri ed ammidi dell'acido cinnamico come inibitori della formazione di biofilm indotta da Candida albicans. La ricerca è originale e condotta con rigore metodologico.

7) D. De Vita, F. Pandolfi, L. Omano, M. Feroci, I. Chiarotto, I. Sileno, F. Pepi, R. Costi, R. Di Santo, L. Scipione. J. Enzyme Inhib. Med. Chem. (2016), 31, 106-113. *L'articolo riporta la sintesi e l'attività anticolinesterasica di una serie di N,N-dimetilcarbammati contenenti un gruppo N,N-dibenzilamminico. Il lavoro è condotto con buon rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

8) D. De Vita, F. Pandolfi, R. Cirilli, L. Scipione, R. Di Santo, L. Friggeri, M. Mori, D. Fiorucci, G. Maccari, R. S. Arul Christopher, C. Zamperini, V. Pau, A. De Logu, S. Tortorella, M. Botta. Eur. J. Med. Chem. (2016), 121, 169-180. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), è originale e condotto con rigore metodologico. Vengono riportati derivati imidazolici come potenziali agenti antiprotozoari che vengono valutati in silico mediante studi di docking molecolare nella sterol 14 α -demetilasi ed in vitro su diversi protozoi patogeni per l'uomo.*

9) D. De Vita, F. Moraca, C. Zamperini, F. Pandolfi, R. Di Santo, A. Matheussen, L. Maes, S. Tortorella, L. Scipione. Eur. J. Med. Chem. (2016), 113, 28-33. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1) descrive un approccio originale per la ricerca di nuovi hit/lead compounds nel campo dei farmaci antitubercolari al fine di sviluppare nuovi agenti contro le specie divenute resistenti. Librerie commerciali e in-house sono state valutate in silico sulla base di un farmacoforo ligand-based al fine di selezionare i composti testati sulla specie batterica.*

10) L. Friggeri, D. De Vita, F. Pandolfi, S. Tortorella, R. Costi, R. Di Santo, L. Scipione. J. Enzyme Inhib. Med. Chem. (2015), 30, 166-172. *Il lavoro descrive la sintesi e valutazione biologica di derivati dell'acido 3,4-diidrossibenzoico con azione chelante ed inibitrice nei confronti dell'acetilcolinesterasi, di potenziale interesse per lo sviluppo di agenti utili contro patologie neurodegenerative. Il lavoro, condotto con rigore metodologico, è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

11) D. De Vita, L. Friggeri, F. D. D'Auria, F. Pandolfi, F. Piccoli, S. Panella, A. T. Palamara, G. Simonetti, L. Scipione, R. Di Santo, R. Costi, S. Tortorella. Bioorg. Med. Chem. Lett. (2014), 24, 1502-1505. *Il lavoro, condotto in modo rigoroso, è pubblicato su una rivista di medio impatto (Q3). Viene descritta la valutazione della capacità di inibire la formazione di biofilm prodotto da Candida Albicans da parte dell'acido caffeico e di suoi derivati di nuova sintesi.*

12) F. Moraca, D. De Vita, F. Pandolfi, R. Di Santo, R. Costi, R. Cirilli, F. D. D'Auria, S. Panella, A. T. Palamara, G. Simonetti, M. Botta, L. Scipione. Eur. J. Med. Chem. (2014), 83, 665-673. *L'articolo riporta una serie di derivati 2-(1H-imidazol-1-il)-1-feniletanolicoli con attività in vitro contro diverse specie fungine, in certi casi comparabile o superiore a quella del fluconazolo, ed è corredato da studi modellistici ligand-based. Il lavoro è condotto con buon rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La candidata PANDOLFI presenta alla valutazione n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor e 5 poster a congressi.

Valutazione sulla produzione complessiva

La candidata PANDOLFI presenta pubblicazioni originali ed innovative condotte con rigore metodologico e con risultati rilevanti nel panorama scientifico internazionale. La produzione è in buona parte congruente con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. La produzione scientifica è globalmente buona, continua nel tempo e pubblicata su riviste di diversa collocazione editoriale e diffusione all'interno della comunità scientifica, a volte ottima, a volte discreta. La produzione complessiva consiste

di 15 pubblicazioni, per le quali la candidata dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 5$; Citazioni totali = 66; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 4,4, IF Totale (15 pubblicazioni) = 53,86; IF Medio: 3,59. L'apporto individuale è facilmente enucleabile nelle 3 pubblicazioni nelle quali risulta come primo autore, di cui 2 non sono pertinenti con il SSD oggetto del presente bando. La candidata è autrice anche di 5 presentazioni poster a congressi e ha ottenuto un finanziamento presso L'Università La Sapienza di Roma ("Avvio alla Ricerca 2016). In conclusione, la candidata ha raggiunto un buon livello scientifico nel campo della ricerca su tematiche specifiche del SSD CHIM/08 e esperienza adeguata nelle linee di ricerca indicate nel bando, anche se in alcune pubblicazioni recenti mostra un'attività di ricerca non congruente con il settore del bando. L'esperienza scientifica maturata della candidata è parzialmente congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

GIUDIZIO COLLEGALE

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2017.
2. Laurea in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche conseguito presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2013. E
3. Assegno di ricerca, presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01/04/2018 ad oggi.
4. Borsa di studio Presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria, dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01/01/2017 al 31/03/2018.
5. Comunicazioni a Congressi: 5 presentazioni poster.

Valutazione dei titoli

La candidata PANDOLFI ha conseguito la Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche nel 2013 presso l'Università di Roma "La Sapienza" e nel 2017 il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche presso il medesimo Ateneo. Ha avuto una borsa di studio presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria, alla Università di Roma "La Sapienza" dal 01/01/2017 al 31/03/2018 e successivamente un assegno di ricerca, presso lo stesso Dipartimento, dal 01/04/2018 ad oggi. La candidata ha presentato le sue ricerche in 5 comunicazioni poster a Congressi. L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata mette in luce un profilo curriculare di buon livello, per quanto riguarda la continuità temporale dell'attività di ricerca svolta. Il profilo curriculare è parzialmente congruente con il SSD oggetto del concorso e con linee di ricerca indicate nel bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

- 1) F. Pandolfi, L. Mattiello, D. Zane, M. Feroci. *Electrochim. Acta* (2018) 280, 71-76. *In questo lavoro viene descritto il comportamento elettrochimico della 9-metilcaffeina ioduro attraverso l'applicazione di diverse tecniche. Per riduzione catodica essa origina un carbene N-eterociclico instabile in grado di trasformarsi nel prodotto di origine naturale imeniacidina. Il lavoro è ben condotto, è pubblicato su una rivista di ottimo livello in ambito elettrochimico (Q1 - Elettrochimica) e rilevante nell'ambito scientifico di riferimento. Tuttavia esso è poco attinente le tematiche relative all'SSD del presente concorso.*
- 2) V. Poongavanam, A. Corona, C. Svendsen, L. Scipione, N. Grandi, F. Pandolfi, R. Di Santo, R. Costi, F. Esposito, E. Tramontano, J. Kongsted. *MedChemComm* (2018), 9, 562-575. *Il lavoro riporta uno studio di structure-guided virtual screening di una libreria commerciale di composti accoppiato ad una analisi per similarità che ha portato alla scoperta di nuovi inibitori della funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa dell'HIV.*

Studi di mutagenesi hanno fornito informazioni sulla modalità di legame di questi composti. Il lavoro, pubblicato su una rivista di medio livello (Q3), è originale e condotto con rigore metodologico.

3) F. Pandolfi, D. DeVita, M. Bortolami, A. Coluccia, R. Di Santo, R. Costi, V. Andrisano, F. Alabiso, C. Bergamini, R. Fato, M. Bartolini, L. Scipione. Eur. J. Med. Chem. (2017), 141, 197-210. *In questo lavoro viene descritta la progettazione e la sintesi di nuovi derivati piridinici con funzioni carbammica o amidica come inibitori di colineserasi e della aggregazione amiloide. Studi di docking nella acetilcolinesterasi supportano il meccanismo d'azione misto di questi composti. Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), è originale e di buon impatto nello specifico ambito di ricerca.*

4) F. Pandolfi, I. Chiarotto, D. Rocco, M. Feroci. Electrochim. Acta (2017), 254, 358-367. *Questo lavoro descrive la sintesi di benzamidi a partire da desossi-benzoina e dal benzile per scissione del legame C-C. Lo studio è completato da un'ipotesi meccanicistica che giustifica il ruolo dell'ossigeno e dell'anione superossido nel contesto della reazione. Il lavoro è scientificamente valido e pubblicato su una rivista di ottimo livello, ma non affine alle tematiche inerenti il SSD di riferimento per il presente concorso (Q1 - Elettrochimica).*

5) D. De Vita, A. Angeli, F. Pandolfi, M. Bortolami, R. Costi, R. Di Santo, E. Suffredini, M. Ceruso, S. Del Prete, C. Capasso, L. Scipione, C. T. Supuran. J. Enz. Inhib. Med. Chem. (2017), 32, 798-804. *L'articolo riporta la sintesi di nuovi inibitori amidici e solfonamidici dell'anidrasi carbonica del Vibrio Cholerae, proponendo una interessante strategia per lo sviluppo di nuovi antibatterici. Il lavoro, condotto con buon rigore metodologico, è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

6) D. De Vita, G. Simonetti, F. Pandolfi, R. Costi, R. Di Santo, F.D. D'Auria, L. Scipione Bioorg. Med. Chem. Lett. (2016), 26, 5931-5935 *L'articolo è pubblicato su una rivista di livello medio (Q3) e riporta la sintesi di composti attivi contro la formazione di biofilm di Candida Albicans. Il lavoro, di buon rigore scientifico riporta risultati di indubbia rilevanza.*

7) D. De Vita, F. Pandolfi, L. Omano, M. Feroci, I. Chiarotto, I. Sileno, F. Pepi, R. Costi, R. Di Santo, L. Scipione. J. Enz. Inhib. Med. Chem. (2016), 31, 106-113. *Il lavoro riporta la sintesi e lo studio delle relazioni struttura-attività per una serie di N,N-dimetilbarbammati ad azione anticolinesterasica. Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), è originale e condotto con rigore metodologico.*

8) D. De Vita, F. Pandolfi, R. Cirilli, L. Scipione, R. Di Santo, L. Friggeri, M. Mori, D. Fiorucci, G. Maccari, R. S. Arul Christopher, C. Zamperini, V. Pau, A. De Logu, S. Tortorella, M. Botta. Eur. J. Med. Chem. (2016) 121, 169-180. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), riporta uno screening di derivati azolici nei confronti di protozoi patogeni, corredato da uno studio di modellistica molecolare sulle ipotetiche interazioni tra tali inibitori e il target molecolare.*

9) D. De Vita, F. Moraca, C. Zamperini, F. Pandolfi, R. Di Santo, A. Matheussen, L. Maes, S. Tortorella, L. Scipione. Eur. J. Med. Chem. (2016) 113, 28-33. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), riporta la scoperta di composti antitubercolari identificati da librerie di composti pubbliche e in-house. Il lavoro, condotto con rigore metodologico, presenta risultati di buona rilevanza per le ricerche in campo antimicobatterico.*

10) L. Friggeri, D. De Vita, F. Pandolfi, S. Tortorella, R. Costi, R. Di Santo, L. Scipione. J. Enz. Inhib. Med. Chem. (2015), 30, 166-172. *Il lavoro riporta la progettazione, sintesi e la valutazione dell'attività biologica di composti ad azione chelante derivati dell'acido 3,4-diidrossibenzoico inibitori dell'acetilcolinesterasi, quali potenziali agenti contro le patologie neurodegenerative. Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), è scientificamente valida e condotta con rigore metodologico.*

11) D. De Vita, L. Friggeri, F. D. D'Auria, F. Pandolfi, F. Piccoli, S. Panella, A. T. Palamara, G. Simonetti, L. Scipione, R. Di Santo, R. Costi, S. Tortorella. Bioorg. Med.

Chem. Lett. (2014), 24,1502-1505. *L'articolo riporta l'attività inibitrice nei confronti del biofilm di Candida albicans dell'acido caffeico e di alcuni suoi derivati esterei. E' condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di medio livello (Q3).*

12) F. Moraca, D. De Vita, F. Pandolfi, R. Di Santo, R. Costi, R. Cirilli, F. D. D'Auria, S. Panella, A. T. Palamara, G. Simonetti, M. Botta, L. Scipione. Eur. J. Med. Chem. (2014), 83, 665-673. *Il lavoro riporta la sintesi, la separazione enantiomerica e la valutazione dell'attività antifungina contro Candida albicans di una serie di derivati imidazolici. Lo studio, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), è originale e ha rilevanza scientifica notevole.*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La candidata PANDOLFI presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor e 5 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

La candidata PANDOLFI presenta pubblicazioni nelle quali si denota un approccio metodologico rigoroso; sono molto rilevanti nell'ambito del panorama scientifico internazionale, originali e innovative. La produzione è quasi interamente congruente con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. La produzione scientifica riportata su riviste a diffusione internazionale dotate di media o ottima collocazione editoriale e diffusione all'interno della comunità scientifica è globalmente buona e continua nel tempo. Il numero totale delle pubblicazioni è pari a 15, e per queste la candidata dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 5$; Citazioni totali = 66; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 4,4, IF Totale (15 pubblicazioni) = 53,86; IF Medio: 3,59. L'apporto individuale è facilmente enucleabile nelle 3 pubblicazioni nelle quali risulta come primo autore, di cui 2 sono non pertinenti con il SSD oggetto del presente bando. Comunque, tenuto conto anche dell'attività scientifica globale sviluppata dalla candidata stessa, la Commissione ritiene che vi siano evidenti elementi di giudizio per individuare il suo apporto alla progettazione e sintesi anche nelle pubblicazioni dove non è in evidenza. La candidata ha presentato i propri risultati scientifici in 5 presentazioni poster a Congressi e ha ottenuto un finanziamento "Avvio alla Ricerca 2016", presso l'Università di Roma "La Sapienza". Nell'ultimo periodo, come dimostrano le pubblicazioni presentate, si delinea un'attività di ricerca in settore non congruente con quello richiesto nel bando. Comunque si può concludere che la candidata ha raggiunto un buon livello scientifico nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08, e ha maturato una adeguata esperienza scientifica nelle linee di ricerca indicate nel bando.

CANDIDATO: PESCATORI LUCA

COMMISSARIO 1

Prof. Roberto Di Santo

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche conseguito presso l'Università di Parma nel 2010.
2. Laurea Specialistica in Chimica conseguita nel 2006 presso l'Università di Parma.
3. Borsa di studio presso il Dipartimento di Chimica Organica e Industriale dell'Università di Parma dal settembre a dicembre 2006.
4. Borsa di studio presso il Dipartimento di Chimica Organica e Industriale dell'Università di Parma dal 10-03-2010 al 10-09-2010.

5. CO.CO.CO. della durata di 18 mesi presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 30 novembre 2010.
6. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01-08-2012 al 31-07-2013.
7. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01-10-2013 al 30-09-2014.
8. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01-01-2015 al 31-12-2015.
9. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Scienze Ambientali dell'Università "La Sapienza" di Roma dal 01-02-2016 a 31/01/2017.
10. Domanda di brevetto dal titolo PCT Int. Appl. (2013), WO 2013182254.
11. Premio miglior poster innovazione scientifica al congresso NMMC 2016, Perugia.
12. Comunicazione orale a 1 Congresso e 4 presentazioni poster.

Valutazione dei titoli

Il candidato PESCATORI ha conseguito la laurea specialistica in Chimica nel 2006 presso l'Università degli Studi di Parma e il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche nel 2010 conseguito presso la medesima Università con una tesi dal titolo: Synthesis and properties of Calix[n]arene receptors for the preparation of "active" organic-inorganic hybrid material. Ottiene una borsa di studio presso il Dipartimento di Chimica Organica e Industriale dell'Università degli Studi di Parma dal settembre a dicembre 2006 e successivamente una presso lo stesso Dipartimento dal 10-03-2010 al 10-09-2010. Nel Novembre 2010 ha un contratto di Collaborazione Coordinata e Continuativa della durata di 18 mesi presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma la Sapienza. Vince un assegno di ricerca dal 01-08-2012 al 31-07-2013, poi un altro dal 01-10-2013 al 30-09-2014, e ancora uno dal 01-01-2015 al 31-12-2015 sempre presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma la Sapienza. Successivamente vince un assegno di ricerca presso il Dip. di Scienze Ambientali dello stesso Ateneo dal 01-02-2016 a 31/01/2017. E' coinventore in una domanda di brevetto internazionale PCT Int. Appl. (2013), WO 2013182254. Ha presentato la sua attività scientifica a vari congressi con 1 comunicazione orale e 4 presentazioni poster. In uno di questi congressi (NMMC 2016 Perugia) ottiene il premio come miglior poster innovazione scientifica. L'analisi dei titoli prodotti dal candidato mette in luce un profilo curriculare di eccellente livello. L'attività di ricerca svolta è pienamente congruente con il SSD oggetto del concorso e con linee di ricerca del bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

- 1) R. Costi, G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messori, L. Scipione, S. Tortorella, A. Amoroso, E. Crespan, P. Campiglia, B. Maresca, A. Porta, I. Granata, E. Novellino, J. Gouge, M. Delarue, G. Maga, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2013, 56, 7431-7441. *Il lavoro descrive la progettazione sintesi e attività biologica di nuovi composti non nucleosidici a struttura dichetoacida che inibiscono la terminal desossinucleotidil trasferasi umana. Sono riportati anche studi strutturalistici che delineano le interazioni tra tali inibitori ed il target biologico. La ricerca descritta denota rigore metodologico ed è di grande interesse nel campo dei prodotti antitumorali. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 2) R. Costi, M. Metifiot, F. Esposito, G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messori, L. Scipione, S. Tortorella, L. Zinzula, C. Marchand, Y. Pommier, E. Tramontano R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2013, 56, 8588-8598. *Il lavoro descrive una serie di pirrolidichetoacidi che inibiscono sia l'integrasi che la ribonucleasi H della trascrittasi inversa di HIV-1. Sono descritti come inibitori duali proponendo un approccio multi-target nella terapia anti-HIV-1,*

approccio molto innovativo e rilevante nel settore degli antiretrovirali. Lo studio è condotto con grande rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).

3) A. Corona, F. S. Di Leva, S. Thierry, L. Pescatori, G. Cuzzucoli Crucitti, F. Subra, O. Delelis, F. Esposito, G. Rigogliuso, R. Costi, S. Cosconati, E. Novellino, R. Di Santo, E. Tramontano. *Antimicrob. Agents Chemother.* 2014, 58, 6101-6110. *Il lavoro descrive lo studio delle interazioni tra composti a struttura pirrolidichetoacida e l'enzima di HIV-1 trascrittasi inversa, in particolare con la funzione ribonucleasica H di questo enzima. Sono definite le interazioni mediante uno studio combinato modellistico e di mutagenesi. Il lavoro è condotto con grande rigore metodologico e apporta importanti avanzamenti nell'ambito dell'inibizione di tale funzione enzimatica della trascrittasi inversa di HIV e nell'ambito dei composti ad attività antiretrovirale in generale. E' pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1 - Pharmacy).*

4) R. Costi, M. Metifiot, S. Chung, G. Cuzzucoli Crucitti, K. Maddali, L. Pescatori, A. Messori, V. Noemi Madia, G. Pupo, L. Scipione, S. Tortorella, F. S. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. F. J. Le Grice, A. Corona, Y. Pommier, C. Marchand, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2014, 57, 3223-3234. *La pubblicazione descrive la progettazione e sintesi di composti chinolonidichetoacidi caratterizzati da un sostituente amminico, come inibitori dell'integrasi di HIV-1. I composti sono ben caratterizzati sia da un punto di vista chimico che delle proprietà farmacologiche. Tali composti infatti sono anche studiati per valutare l'interazione con un altro target virale, la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa dell'HIV-1. Il lavoro è molto ben condotto ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

5) G. Cuzzucoli Crucitti, M. Metifiot, L. Pescatori, A. Messori, V. Noemi Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. Esposito, A. Corona, M. Cadeddu, C. Marchand, Y. Pommier, E. Tramontano, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2015, 58, 1915-1928. *Nella pubblicazione in oggetto è presentato uno studio SAR su composti pirrolidichetoacidi che risultano inibitori duali dell'integrasi e della ribonucleasi H di HIV-1. I composti mostrano anche un'ottima attività in cellula infettata dal virus. Tale studio è molto rilevante soprattutto per l'aspetto di novità dell'approccio multi-target nel campo dell'HIV-1. E' condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1).*

6) L. Pescatori, M. Metifiot, S. Chung, T. Masoaka, G. Cuzzucoli Crucitti, A. Messori, G. Pupo, V. Noemi Madia, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. S. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. F. J. Le Grice, Y. Pommier, C. Marchand, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2015, 58, 4610-4623. *Studio SAR su composti chinolinonidichetoacidi nel quale sono definiti i requisiti strutturali per indirizzare l'azione contro l'enzima integrasi di HIV, anziché contro la funzione ribonucleasica della trascrittasi inversa. Il lavoro è ben condotto e realizzato ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

7) G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. S. Di Leva, S. Cosconati, E. Novellino, Z. Debyser, F. Christ, R. Costi, R. Di Santo. *Eur. J. Med. Chem.* 2015, 101, 288-294. *Il lavoro descrive la scoperta di una classe di composti a struttura N-aril-naftilamminica che vengono riposizionati come composti ad attività inibitrice nei confronti dell'interazione proteina-proteina integrasi dell'HIV-1/LEDGF umana. Il lavoro è molto originale e ben condotto. E' stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

8) T. Schmid, J. S. Blees, M. M. Bajer, J. Wild, L. Pescatori, G. Cuzzucoli Crucitti, L. Scipione, R. Costi, C. J. Henrich, B. Brüne, N. H. Colburn, R. Di Santo. *Plos One*, 2016, 1-14. *Il lavoro riporta la scoperta di un composto a struttura diarilsulfurea che stabilizza il soppressore tumorale Pcd4. Lo studio è condotto con grande rigore metodologico ed apporta una importante novità nel settore dei composti ad attività antitumorale grazie ad*

un approccio molto innovativo. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 Multidisciplinary).

9) A. Corona, F. S. Di Leva, G. Rigogliuso, L. Pescatori, V. N. Madia, F. Subra, O. Delelis, F. Esposito, M. Cadeddu, R. Costi, S. Cosconati, E. Novellino, R. Di Santo, E. Tramontano. *Antiv. Res.*, 2016, 236-243. *Il lavoro descrive a fondo le interazioni tra alcuni composti a struttura pirrolidicheto acida e l'enzima integrasi di HIV-1. E' riportato un interessante confronto con l'interazione che tali composti hanno anche nei confronti della ribonucleasi H. E' molto interessante nel campo dei composti anti-HIV perché definisce le caratteristiche strutturali di un composto per indirizzare l'attività verso uno dei due target rispetto all'altro. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 – Pharmacy).*

10) F. Saccoliti, G. Angiulli, G. Pupo, L. Pescatori, V. N. Madia, A. Messori, G. Colotti, A. Fiorillo, L. Scipione, M. Gramiccia, T. Di Muccio, R. Di Santo, R. Costi, A. Ilari. *J. Enz. Inhib. Med. Chem.*, 2017, 32, 304-310. *Il lavoro descrive la scoperta di un nuovo inibitore della tripanotione reduttasi di Leishmania infantum. Sono riportati sia studi strutturalistici che la caratterizzazione biochimica. Lo studio è rilevante dal momento che riporta un nuovo inibitore di questo target che si propone come importante punto di partenza per lo sviluppo di una nuova classe di composti antiprotozoari. Il lavoro denota grande rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

11) V. N. Madia, R. Benedetti, M. L. Barreca, L. Ngo, L. Pescatori, A. Messori, G. Pupo, F. Saccoliti, S. Valente, A. Mai, L. Scipione, Y. G. Zheng, C. Tintori, M. Botta, V. Cecchetti, L. Altucci, R. Di Santo, R. Costi *ChemMedChem*. 2017, 12, 1359-1368. *Il lavoro descrive le SAR di una serie di composti a struttura base cinnamoillica in grado di inibire un target epigenetico: l'istone acetil transferasi p300. Lo studio è condotto con rigore metodologico e porta interessanti avanzamenti in questo settore di indagine. E' pubblicato su una rivista di buon livello (Q2).*

12) F. Saccoliti, V. N. Madia, V. Tudino, A. De Leo, L. Pescatori, A. Messori, D. De Vita, L. Scipione, R. Brun, M. Kaiser, P. Maser, C. M. Calvet, G. K. Jennings, L. M. Podust, R. Costi, R. Di Santo. *Eur. J. Med. Chem.* 2018, 156, 53-60. *Il lavoro descrive il riposizionamento di alcuni agenti antifungini azolici nel campo dei composti ad azione antiprotozoaria e ne viene valutata anche l'attività in vivo. Il lavoro è ben strutturato e molto rilevante nel settore dei farmaci anti-tripanosomiaci. E' pubblicato in una rivista di ottimo livello (Q1).*

TESI DOTTORATO

Titolo: Synthesis and properties of Calix[n]arene receptors for the preparation of "active" organic-inorganic hybrid material. La tesi tratta della sintesi e proprietà di calixareni e dei loro possibili impieghi come recettori e nella chimica supramolecolare. La tesi è ben articolata e riporta un lavoro ottimo sia dal punto di vista qualitativo che nella mole di lavoro svolto e risulta descritta in modo rigoroso sia da un punto di vista scientifico che metodologico.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il candidato PESCATORI presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, tesi di Dottorato, 1 domanda di brevetto, 1 Comunicazione orale e 4 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

Il candidato PESCATORI presenta pubblicazioni originali, innovative e nelle quali si denota rigore metodologico. Tali pubblicazioni presentano un'ottima rilevanza considerando il panorama scientifico internazionale. La produzione è congruente con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. La produzione globalmente è

quantificabile in 28 pubblicazioni. Per le 28 pubblicazioni il candidato dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 12$; Citazioni totali = 340; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 12,14; IF Totale (28 pubblicazioni) = 120,24. IF Medio: 4,294. La produzione scientifica è globalmente eccellente, continua nel tempo e riportata su riviste a diffusione internazionale dotate di ottima collocazione editoriale e diffusione all'interno della comunità scientifica. L'apporto individuale è facilmente enucleabile in una pubblicazione nella quale il candidato è presente come primo nome. Il candidato ha presentato i propri risultati scientifici in 1 Comunicazione orale e 4 presentazioni poster a Congressi. Durante la sua attività di ricerca ha ottenuto i seguenti finanziamenti come PI: progetto avvio alla ricerca 2015, Università di Roma La Sapienza, e progetto per avvio alla ricerca 2016 Università di Roma La Sapienza. Ha partecipato inoltre a due finanziamenti, PRIN 2008 e PRIN 2010-2011. Il candidato ha raggiunto pertanto un livello scientifico eccellente che lo pone in posizione di preminenza per ricoprire posizioni di rilievo nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08. L'esperienza scientifica maturata del candidato è congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

COMMISSARIO 2

Prof. Pietro Campiglia

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche conseguito presso l'Università di Parma nel 2010.
2. Laurea Specialistica in Chimica conseguita nel 2006 presso l'Università di Parma.
3. Borsa di studio presso il Dipartimento di Chimica Organica e Industriale dell'Università di Parma dal settembre a dicembre 2006.
4. Borsa di studio presso il Dipartimento di Chimica Organica e Industriale dell'Università di Parma dal 10-03-2010 al 10-09-2010.
5. CO.CO.CO. della durata di 18 mesi presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 30 novembre 2010.
6. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01-08- 2012 al 31-07-2013.
7. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01-10-2013 al 30-09-2014.
8. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01-01-2015 al 31-12-2015.
9. Assegno di ricerca presso Dipartimento di Scienze Ambientali dell'Università "La Sapienza" di Roma dal 01-02-2016 a 31/01/2017.
10. Domanda di brevetto dal titolo PCT Int. Appl. (2013), WO 2013182254.
11. Premio miglior poster innovazione scientifica al congresso NMMC 2016, Perugia.
12. Comunicazione orale a 1 Congresso e 4 presentazioni poster.

Valutazione sui titoli

Il candidato Pescatori ha conseguito Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università degli studi di Parma nel 2010, trattando argomenti di ricerca che risultano non inerenti il SSD oggetto del presente concorso. Le attività svolte fino a tutto il 2010 non sembrano, parimenti, presentare congruenza con il SSD oggetto del presente concorso e con le tematiche del bando. Da quella data in poi, si scorge, invece, una forte attinenza dell'attività scientifica del candidato con le tematiche del presente concorso e con il SSD relativo. Il candidato dichiara 1 comunicazione orale, 5 poster a congresso ed una domanda di Brevetto internazionale. La sua attività scientifica è stata anche premiata con

il miglior poster per l'innovazione scientifica al congresso NMMC 2016 di Perugia. Il giudizio in merito ai titoli presentati è molto buono.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1) R. Costi, G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messore, L. Scipione, S. Tortorella, A. Amoroso, E. Crespan, P. Campiglia, B. Maresca, A. Porta, I. Granata, E. Novellino, J. Gouge, M. Delarue, G. Maga, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2013, 56, 7431-7441. *Il lavoro è incentrato sul design, la sintesi e la valutazione farmacologica di nuovi composti a struttura dichetoacida in grado di inibire la desossinucleotidil trasferasi umana. Sono riportati anche studi cristallografici che definiscono le basi molecolari dell'interazione tra le molecole ed il loro bersaglio biologico. La ricerca descritta denota rigore metodologico ed è di grande interesse nel campo scientifico di riferimento. E' pubblicato su una rivista di primissimo livello (Q1).*

2) R. Costi, M. Metifiot, F. Esposito, G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messore, L. Scipione, S. Tortorella, L. Zinzula, C. Marchand, Y. Pommier, E. Tramontano R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2013, 56, 8588-8598. *Il lavoro è incentrato sulla sintesi di derivati pirrolidichetoacidi come doppi inibitori sia dell'integrasi che della ribonucleasi H del virus HIV-1. L'approccio seguito è innovativo nel campo scientifico di riferimento, persegue un notevole rigore metodologico ed il lavoro è pubblicato su una rivista di primissimo livello (Q1).*

3) A. Corona, F. S. Di Leva, S. Tierry, L. Pescatori, G. Cuzzucoli Crucitti, F. Subra, O. Delelis, F. Esposito, G. Rigogliuso, R. Costi, S. Cosconati, E. Novellino, R. Di Santo, E. Tramontano. *Antimicrob. Agents Chemother.* 2014, 58, 6101-6110. *Il lavoro è basato sullo studio delle interazioni tra composti pirrolidichetoacidi e l'enzima di HIV-1 trascrittasi inversa. Il focus è rivolto alla funzione ribonucleasica H di questo enzima. Gli studi di molecular modelling effettuati sono validati da esperimenti di mutagenesi. Il lavoro è condotto con grande rigore scientifico e assume grandissima rilevanza nell'ambito scientifico di riferimento. E' pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1 - Pharmacy).*

4) R. Costi, M. Metifiot, S. Chung, G. Cuzzucoli Crucitti, K. Maddali, L. Pescatori, A. Messore, V. Noemi Madia, G. Pupo, L. Scipione, S. Tortorella, F. S. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. F. J. Le Grice, A. Corona, Y. Pommier, C. Marchand, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2014, 57, 3223-3234. *La pubblicazione descrive la progettazione e sintesi di composti chinolonidichetoacidi caratterizzati da un sostituito amminico, come inibitori dell'integrasi di HIV-1. I composti sono ben caratterizzati sia da un punto di vista chimico che delle proprietà farmacologiche. Tali composti infatti sono anche studiati per valutare l'interazione con un altro target virale, la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa dell'HIV-1. Il lavoro è molto ben condotto ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

5) G. Cuzzucoli Crucitti, M. Metifiot, L. Pescatori, A. Messore, V. Noemi Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. Esposito, A. Corona, M. Cadeddu, C. Marchand, Y. Pommier, E. Tramontano, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2015, 58, 1915-1928. *Nella pubblicazione in oggetto è presentato uno studio SAR su composti pirrolidichetoacidi che risultano inibitori duali dell'integrasi e della ribonucleasi H di HIV-1. I composti mostrano anche un'ottima attività in cellula infettata dal virus. Tale studio è molto rilevante soprattutto per l'aspetto di novità dell'approccio multi-target nel campo dell'HIV-1. E' condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1).*

6) L. Pescatori, M. Metifiot, S. Chung, T. Masoaka, G. Cuzzucoli Crucitti, A. Messore, G. Pupo, V. Noemi Madia, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. S. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. F. J. Le Grice, Y. Pommier, C. Marchand, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2015, 58, 4610-4623. *In questo studio sono descritti i requisiti strutturali fondamentali dei derivati chinolinonil dichetoacidi per un'azione inibitoria*

selettiva verso l'enzima integrasi di HIV. Il lavoro è ben condotto e realizzato e è pubblicato su una rivista di primissimo livello in ambito chimico-farmaceutico (Q1).

7) G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. S. Di Leva, S. Cosconati, E. Novellino, Z. Debyser, F. Christ, R. Costi, R. Di Santo. Eur. J. Med. Chem. 2015, 101, 288-294. *Il lavoro descrive l'identificazione di derivati a struttura N-aril-naftilamminica derivanti da un'operazione di drug-repositioning ed attivi come inibitori dell'interazione proteina-proteina tra integrasi dell'HIV-1 e LEDGF umana. Il lavoro è molto originale e ben condotto. E' stato pubblicato su una rivista di altissimo livello (Q1).*

8) T. Schmid, J. S. Blees, M. M. Bajer, J. Wild, L. Pescatori, G. Cuzzucoli Crucitti, L. Scipione, R. Costi, C. J. Henrich, B. Brüne, N. H. Colburn, R. Di Santo Plos One, 2016, 1-14. *E' descritta l'identificazione di un composto a struttura diarilsulfurea che stabilizza il soppressore tumorale Pcd4. Lo studio è caratterizzato dall'originalità, dal grande rigore metodologico ed apporta una importante novità nel settore scientifico di riferimento. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 Multidisciplinary).*

9) A. Corona, F. S. Di Leva, G. Rigogliuso, L. Pescatori, V. N. Madia, F. Subra, O. Delelis, F. Esposito, M. Cadeddu, R. Costi, S. Cosconati, E. Novellino, R. Di Santo, E. Tramontano. Antiv. Res., 2016, 236-243. *Il lavoro è basato sulle interazioni molecolari intercorrenti tra composti a struttura pirrolidicheto acida e l'integrasi di HIV-1 confrontate con le interazioni fondamentali intercorrenti con la ribonucleasi H dello stesso virus. E' un lavoro condotto con notevole rigore metodologico contenente risultati rilevanti dal punto di vista scientifico. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1- Pharmacy).*

10) F. Saccoliti, G. Angiulli, G. Pupo, L. Pescatori, V. N. Madia, A. Messori, G. Colotti, A. Fiorillo, L. Scipione, M. Gramiccia, T. Di Muccio, R. Di Santo, R. Costi, A. Ilari. J. Enz. Inhib. Med. Chem., 2017, 32, 304-310. *Il lavoro descrive la scoperta di un nuovo diaril solfuro inibitore della tripanotione reduttasi del parassita Leishmania infantum. Lo studio è basato sulla determinazione delle caratteristiche strutturali di interazione con il target e conseguente valutazione farmacologica. Il lavoro denota grande rigore metodologico, rilevanza scientifica ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

11) V. N. Madia, R. Benedetti, M. L. Barreca, L. Ngo, L. Pescatori, A. Messori, G. Pupo, F. Saccoliti, S. Valente, A. Mai, L. Scipione, Y. G. Zheng, C. Tintori, M. Botta, V. Cecchetti, L. Altucci, R. Di Santo, R. Costi ChemMedChem. 2017, 12, 1359-1368. *Il lavoro si basa sulla definizione delle relazioni struttura-attività di una libreria di composti a struttura cinnamoilica in grado di inibire l'istone acetil transferasi p300. Lo studio è condotto con rigore metodologico e reca interessanti spunti ed avanzamenti in questo ambito scientifico. E' pubblicato su una rivista di buon livello (Q2).*

12) F. Saccoliti, V. N. Madia, V. Tudino, A. De Leo, L. Pescatori, A. Messori, D. De Vita, L. Scipione, R. Brun, M. Kaiser, P. Maser, C. M. Calvet, G. K. Jennings, L. M. Podust, R. Costi, R. Di Santo. Eur. J. Med. Chem. 2018, 156, 53-60. *Il lavoro descrive un processo di drug-repositioning di nuclei azolici ad originale attività antifungina nel campo degli antiprotozoari, con conseguente valutazione farmacologica in vivo. Il lavoro è originale, persegue rigore scientifico ed è molto rilevante nel settore drug discovery. E' pubblicato in una rivista di primissimo livello (Q1).*

TESI DOTTORATO

Titolo: Synthesis and properties of Calix[n]arene receptors for the preparation of "active" organic-inorganic hybrid material. La tesi tratta della sintesi e della caratterizzazione chimico-fisica di calixareni e dei loro possibili impieghi come recettori e nella chimica supramolecolare. La tesi è ben articolata e condotta in modo rigoroso sia da un punto di vista scientifico che metodologico.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il candidato PESCATORI presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, tesi di Dottorato, 1 domanda di brevetto, 1 Comunicazione orale e 4 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

Il candidato ha presentato a valutazione numero 12 pubblicazioni, su riviste a diffusione internazionale dotate di buona collocazione editoriale. In 1 di queste pubblicazioni risulta primo autore, mentre 10 presentano co-autori internazionali. La produzione scientifica è stata continua nell'arco temporale considerato e sempre attinente alle tematiche inerenti il SSD di riferimento per il presente concorso. Lo stesso dicasi per la comunicazione ed i poster presentati a congresso. La produzione globalmente è quantificabile in 28 pubblicazioni. Per le 28 pubblicazioni il candidato dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 12$; Citazioni totali = 340; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 12,14; IF Totale (28 pubblicazioni) = 120,24. IF Medio: 4,294. La produzione scientifica è globalmente eccellente. Durante la sua attività di ricerca ha ottenuto i seguenti finanziamenti come PI: progetto avvio alla ricerca 2015, Università di Roma La Sapienza, e progetto per avvio alla ricerca 2016 Università di Roma La Sapienza. Ha partecipato inoltre a due finanziamenti, PRIN 2008 e PRIN 2010-2011. Il candidato ha raggiunto pertanto un livello scientifico eccellente nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08.

COMMISSARIO 3

Prof.ssa Silvia Rivara

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche conseguito presso l'Università di Parma nel 2010.
2. Laurea Specialistica in Chimica conseguita nel 2006 presso l'Università di Parma.
3. Borsa di studio presso il Dipartimento di Chimica Organica e Industriale dell'Università di Parma dal settembre a dicembre 2006.
4. Borsa di studio presso il Dipartimento di Chimica Organica e Industriale dell'Università di Parma dal 10-03-2010 al 10-09-2010.
5. CO.CO.CO. della durata di 18 mesi presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 30 novembre 2010.
6. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01-08-2012 al 31-07-2013.
7. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01-10-2013 al 30-09-2014.
8. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 01-01-2015 al 31-12-2015.
9. Assegno di ricerca presso Dipartimento di Scienze Ambientali dell'Università "La Sapienza" di Roma dal 01-02-2016 a 31/01/2017.
10. Domanda di brevetto dal titolo PCT Int. Appl. (2013), WO 2013182254.
11. Premio miglior poster innovazione scientifica al congresso NMMC 2016, Perugia.
12. Comunicazione orale a 1 Congresso e 4 presentazioni poster.

Valutazione sui titoli

Il candidato PESCATORI ha conseguito la laurea specialistica in Chimica nel 2006 e il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche nel 2010 presso l'Università degli Studi di Parma

con una tesi dal titolo: Synthesis and properties of Calix[n]arene receptors for the preparation of "active" organic-inorganic hybrid material.

Il candidato è stato titolare di una borsa di studio presso il Dipartimento di Chimica Organica e Industriale dell'Università degli Studi di Parma dal settembre a dicembre 2006 e di un'altra presso lo stesso Dipartimento dal 10-03-2010 al 10-09-2010. Nel Novembre 2010 è stato titolare di un contratto di Collaborazione Coordinata e Continuativa della durata di 18 mesi presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma la Sapienza. E' stato titolare di tre assegni di ricerca, dal 01-08-2012 al 31-07-2013, dal 01-10-2013 al 30-09-2014, e dal 01-01-2015 al 31-12-2015, sempre presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza". Successivamente ha vinto un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Scienze Ambientali dello stesso Ateneo dal 01-02-2016 a 31/01/2017. E' co-inventore in una domanda di brevetto internazionale PCT Int. Appl. (2013), WO 2013182254. Ha presentato la sua attività scientifica a vari congressi con 1 comunicazione orale e 4 poster. Nel meeting NMMC 2016 a Perugia ha ottenuto un premio per il miglior poster dedicato all'innovazione scientifica. L'analisi dei titoli prodotti dal candidato rivela un profilo curriculare di eccellente livello. L'attività di ricerca svolta è pienamente congruente con il SSD oggetto del concorso. L'esperienza scientifica maturata dal candidato è congruente con le linee di ricerca indicate nel bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

- 1) R. Costi, G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messori, L. Scipione, S. Tortorella, A. Amoroso, E. Crespan, P. Campiglia, B. Maresca, A. Porta, I. Granata, E. Novellino, J. Gouge, M. Delarue, G. Maga, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2013, 56, 7431-7441. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), descrive la sintesi e attività biologica di nuovi composti non nucleosidici che inibiscono la terminal desossinucleotidil trasferasi umana, con studi strutturali che chiariscono le interazioni tra tali inibitori ed il target biologico. La ricerca denota rigore metodologico ed è di sicuro interesse in campo chimico-farmaceutico.*
- 2) R. Costi, M. Metifiot, F. Esposito, G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messori, L. Scipione, S. Tortorella, L. Zinzula, C. Marchand, Y. Pommier, E. Tramontano R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2013, 56, 8588-8598. *L'articolo, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), riporta la sintesi e studi SAR di una serie di dichetoacidi che inibiscono sia l'attività dell'enzima integrasi che quella ribonucleasica H della trascrittasi inversa. Viene proposto un approccio multi-target nella terapia antivirale contro infezioni da HIV-1. L'approccio è interessante e lo studio è condotto con buon rigore metodologico.*
- 3) A. Corona, F. S. Di Leva, S. Thierry, L. Pescatori, G. Cuzzucoli Crucitti, F. Subra, O. Delelis, F. Esposito, G. Rigogliuso, R. Costi, S. Cosconati, E. Novellino, R. Di Santo, E. Tramontano. *Antimicrob. Agents Chemother.* 2014, 58, 6101-6110. *Il lavoro, pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1 - Pharmacy), riporta lo studio delle interazioni tra composti a struttura dichetoacida e l'enzima di HIV-1 trascrittasi inversa, in particolare con la sua funzione ribonucleasica H, tramite modelli molecolari e studi di mutagenesi. Il lavoro, condotto con ottimo rigore metodologico, porta a risultati di assoluta rilevanza nell'ambito dei composti ad attività antiretrovirale.*
- 4) R. Costi, M. Metifiot, S. Chung, G. Cuzzucoli Crucitti, K. Maddali, L. Pescatori, A. Messori, V. Noemi Madia, G. Pupo, L. Scipione, S. Tortorella, F. S. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. F. J. Le Grice, A. Corona, Y. Pommier, C. Marchand, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2014, 57, 3223-3234. *L'articolo riporta la sintesi di composti dichetoacidi inibitori dell'integrasi di HIV-1. Viene valutata anche l'interazione con la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa del virus HIV-1. Il lavoro, di buona qualità scientifica, è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

- 5) G. Cuzzucoli Crucitti, M. Metifiot, L. Pescatori, A. Messori, V. Noemi Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. Esposito, A. Corona, M. Cadeddu, C. Marchand, Y. Pommier, E. Tramontano, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2015, 58, 1915-1928. *Nuovi composti dichetoacidi vengono descritti come inibitori multitarget dell'integrasi e della ribonucleasi H di HIV-1 con buona attività in cellule infettate dal virus. Lo studio denota un buon rigore metodologico ed è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1).*
- 6) L. Pescatori, M. Metifiot, S. Chung, T. Masoaka, G. Cuzzucoli Crucitti, A. Messori, G. Pupo, V. Noemi Madia, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. S. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. F. J. Le Grice, Y. Pommier, C. Marchand, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2015, 58, 4610-4623. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), descrive uno studio SAR su composti dichetoacidi in grado di differenziare le azioni contro l'attività integrasica di HIV da quelle contro la funzione ribonucleasica della trascrittasi inversa. Il lavoro è di buona qualità e condotto con rigore metodologico.*
- 7) G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. S. Di Leva, S. Cosconati, E. Novellino, Z. Debyser, F. Christ, R. Costi, R. Di Santo. *Eur. J. Med. Chem.* 2015, 101, 288-294. *Una classe di composti N-aril-naftilamminici viene riproposta per l'attività inibitrice nei confronti dell'interazione proteina-proteina dell'enzima integrasi dell'HIV-1 con la proteina LEDGF umana. Il lavoro è di buona qualità e pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 8) T. Schmid, J. S. Blees, M. M. Bajer, J. Wild, L. Pescatori, G. Cuzzucoli Crucitti, L. Scipione, R. Costi, C. J. Henrich, B. Brüne, N. H. Colburn, R. Di Santo. *Plos One*, 2016, 1-14. *L'articolo, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 Multidisciplinary), riporta la scoperta di un composto agente sul soppressore tumorale Pcd4. Lo studio, condotto con buon rigore metodologico, riporta risultati di ottimo impatto in campo antitumorale.*
- 9) A. Corona, F. S. Di Leva, G. Rigogliuso, L. Pescatori, V. N. Madia, F. Subra, O. Delelis, F. Esposito, M. Cadeddu, R. Costi, S. Cosconati, E. Novellino, R. Di Santo, E. Tramontano. *Antiv. Res.*, 2016, 236-243. *L'articolo descrive le interazioni tra alcuni composti a struttura dicheto-acida e l'enzima integrasi di HIV-1, confrontandole con quelle che tali composti presentano nei confronti della ribonucleasi H. Di buon rigore ed interesse, il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 – Pharmacy).*
- 10) F. Saccoliti, G. Angiulli, G. Pupo, L. Pescatori, V. N. Madia, A. Messori, G. Colotti, A. Fiorillo, L. Scipione, M. Gramiccia, T. Di Muccio, R. Di Santo, R. Costi, A. Ilari. *J. Enz. Inhib. Med. Chem.*, 2017, 32, 304-310. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), riporta la scoperta di un nuovo inibitore della tripanotione reduttasi di *Leishmania infantum*, con dati strutturalistici e caratterizzazione biochimica. Lo studio, condotto con buon rigore metodologico, riporta risultati di rilievo per lo sviluppo di nuovi antiprotozoari.*
- 11) V. N. Madia, R. Benedetti, M. L. Barreca, L. Ngo, L. Pescatori, A. Messori, G. Pupo, F. Saccoliti, S. Valente, A. Mai, L. Scipione, Y. G. Zheng, C. Tintori, M. Botta, V. Cecchetti, L. Altucci, R. Di Santo, R. Costi. *ChemMedChem*. 2017, 12, 1359-1368. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di buon livello (Q2), riporta la sintesi di derivati cinnamici inibitori della istone acetiltransferasi p300. Lo studio appare originale e riporta risultati rilevanti dal punto di vista scientifico.*
- 12) F. Saccoliti, V. N. Madia, V. Tudino, A. De Leo, L. Pescatori, A. Messori, D. De Vita, L. Scipione, R. Brun, M. Kaiser, P. Maser, C. M. Calvet, G. K. Jennings, L. M. Podust, R. Costi, R. Di Santo. *Eur. J. Med. Chem.* 2018, 156, 53-60. *L'articolo, pubblicato in una rivista di ottimo livello (Q1), riporta l'attività antiprotozoaria di alcuni antifungini azolici. Il lavoro, condotto con rigore metodologico, porta a risultati rilevanti nel settore dei farmaci antitripanosomiaci.*

Titolo: Synthesis and properties of Calix[n]arene receptors for the preparation of “active” organic-inorganic hybrid material. La tesi è centrata sulla sintesi e proprietà di derivati calixarenici e sui loro possibili impieghi nella chimica supramolecolare. La tesi riporta un lavoro ben orchestrato e di ottimo livello scientifico, dal punto di vista del rigore scientifico e dei risultati ottenuti.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato PESCATORI presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, tesi di Dottorato, 1 domanda di brevetto, 1 Comunicazione orale e 4 poster a congressi.

Valutazione sulla produzione complessiva

Il candidato PESCATORI presenta pubblicazioni originali ed innovative condotte con buon rigore metodologico. La produzione, di ottimo livello e consistenza, è congruente con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. La produzione globalmente è quantificabile in 28 pubblicazioni. Per le 28 pubblicazioni il candidato dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 12$; Citazioni totali = 340; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 12,14; IF Totale (28 pubblicazioni) = 120,24. IF Medio: 4,294. Complessivamente, la produzione scientifica è eccellente, continua nel tempo e riportata su riviste di ottima collocazione editoriale e diffusione all'interno della comunità scientifica. L'apporto individuale è facilmente enucleabile in una pubblicazione nella quale il candidato è presente come primo nome. Il candidato presenta anche 1 comunicazione orale e 4 presentazioni poster a congressi. Durante la sua attività di ricerca ha ottenuto finanziamenti come PI o partecipando ai progetti PRIN 2008 e PRIN 2010-2011. Il candidato ha raggiunto un livello scientifico eccellente, con una posizione di preminenza per ricoprire posizioni di rilievo nel campo della ricerca su tematiche del SSD CHIM/08. L'esperienza scientifica maturata dal candidato è congruente con le linee di ricerca indicate nel bando.

GIUDIZIO COLLEGIALE

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche conseguito presso l'Università di Parma nel 2010.
2. Laurea Specialistica in Chimica conseguita nel 2006 presso l'Università di Parma.
3. Borsa di studio presso il Dipartimento di Chimica Organica e Industriale dell'Università di Parma dal settembre a dicembre 2006.
4. Borsa di studio presso il Dipartimento di Chimica Organica e Industriale dell'Università di Parma dal 10-03-2010 al 10-09-2010.
5. CO.CO.CO. della durata di 18 mesi presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma “La Sapienza” dal 30 novembre 2010.
6. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma “La Sapienza” dal 01-08- 2012 al 31-07-2013.
7. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma “La Sapienza” dal 01-10-2013 al 30-09-2014.
8. Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma “La Sapienza” dal 01-01-2015 al 31-12-2015.
9. Assegno di ricerca presso Dipartimento di Scienze Ambientali dell'Università “La Sapienza” di Roma dal 01-02-2016 a 31/01/2017.
10. Domanda di brevetto dal titolo PCT Int. Appl. (2013), WO 2013182254.
11. Premio miglior poster innovazione scientifica al congresso NMMC 2016, Perugia.

12. Comunicazione orale a 1 Congresso e 4 presentazioni poster.

Valutazione dei titoli

Il candidato PESCATORI ha conseguito la laurea specialistica in Chimica nel 2006 presso l'Università degli Studi di Parma e il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche nel 2010 conseguito presso la medesima Università. Ottiene due borse di studio (09/06-12/06 e 03/10-09/10) presso il Dipartimento di Chimica Organica e Industriale dell'Università degli Studi di Parma. Successivamente ha un CO.CO.CO. di 18 mesi nel periodo 2010/11 presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma la Sapienza. In questo stesso Dipartimento vince vari assegni di ricerca dal 2012 al 2015. Infine vince un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Scienze Ambientali dello stesso Ateneo dal 01-02-2016 a 31/01/2017. E' coinventore in una domanda di brevetto internazionale PCT Int. Appl. (2013), WO 2013182254 ed ha presentato la sua attività scientifica con 1 comunicazione orale e 4 presentazioni poster a Congressi. In uno di questi (NMMC 2016 Perugia) ottiene il premio come miglior poster per l'innovazione scientifica. L'analisi dei titoli prodotti dal candidato mette in luce un profilo curriculare di eccellente livello. L'attività di ricerca svolta è congruente con il SSD oggetto del concorso e con linee di ricerca indicate nel bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

- 1) R. Costi, G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messori, L. Scipione, S. Tortorella, A. Amoroso, E. Crespan, P. Campiglia, B. Maresca, A. Porta, I. Granata, E. Novellino, J. Gouge, M. Delarue, G. Maga, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2013, 56, 7431-7441. *Il lavoro riporta la progettazione, sintesi e valutazione dell'attività biologica di derivati a struttura dichetoacida come inibitori della desossinucleotidil trasferasi umana, con l'analisi delle interazioni proteina/inibitore basate su strutture cristallografiche di complessi. Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1) è di grande interesse nel campo scientifico di riferimento.*
- 2) R. Costi, M. Metifiot, F. Esposito, G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messori, L. Scipione, S. Tortorella, L. Zinzula, C. Marchand, Y. Pommier, E. Tramontano R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2013, 56, 8588-8598. *L'articolo riporta la sintesi e studi SAR di una serie di dichetoacidi che inibiscono sia l'azione integrasica che quella ribonucleasica H della trascrittasi inversa. Viene proposto un approccio multi-target nella terapia antivirale contro infezioni da HIV-1. L'approccio è interessante, lo studio è condotto con buon rigore metodologico ed è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 3) A. Corona, F. S. Di Leva, S. Thierry, L. Pescatori, G. Cuzzucoli Crucitti, F. Subra, O. Delelis, F. Esposito, G. Rigogliuso, R. Costi, S. Cosconati, E. Novellino, R. Di Santo, E. Tramontano. *Antimicrob. Agents Chemother.* 2014, 58, 6101-6110. *Il lavoro riporta la sintesi di derivati pirrolidichetoacidi come inibitori dell'attività ribonucleasica H dell'enzima trascrittasi inversa di HIV. Sono stati condotti studi di modellistica molecolare ed esperimenti di mutagenesi per studiare l'interazione molecolare. Il lavoro è originale e scientificamente valido ed è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1 - Pharmacy).*
- 4) R. Costi, M. Metifiot, S. Chung, G. Cuzzucoli Crucitti, K. Maddali, L. Pescatori, A. Messori, V. Noemi Madia, G. Pupo, L. Scipione, S. Tortorella, F. S. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. F. J. Le Grice, A. Corona, Y. Pommier, C. Marchand, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2014, 57, 3223-3234. *L'articolo riporta la sintesi di composti dichetoacidi inibitori dell'integrasi di HIV-1. Viene valutata anche l'interazione con la funzione ribonucleasica H della trascrittasi inversa dell'HIV-1. Il lavoro, di buona qualità scientifica, è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*

- 5) G. Cuzzucoli Crucitti, M. Metifiot, L. Pescatori, A. Messori, V. Noemi Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. Esposito, A. Corona, M. Cadeddu, C. Marchand, Y. Pommier, E. Tramontano, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2015, 58, 1915-1928. *L'articolo riporta uno studio SAR su composti dichetoacidi che risultano inibitori duali dell'integrasi e della ribonucleasi H del virus HIV-1. I risultati sono interessanti per lo sviluppo di nuovi antivirali. E' condotto con rigore metodologico ed è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1).*
- 6) L. Pescatori, M. Metifiot, S. Chung, T. Masoaka, G. Cuzzucoli Crucitti, A. Messori, G. Pupo, V. Noemi Madia, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. S. Di Leva, S. Cosconati, L. Marinelli, E. Novellino, S. F. J. Le Grice, Y. Pommier, C. Marchand, R. Costi, R. Di Santo. *J. Med. Chem.*, 2015, 58, 4610-4623. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), riporta uno studio sulle relazioni struttura-attività su composti dichetoacidi che differenzia le azioni contro l'attività integrasica di HIV da quelle contro la funzione ribonucleasica della trascrittasi inversa. Il lavoro è di buona qualità e riporta risultati scientifici interessanti.*
- 7) G. Cuzzucoli Crucitti, L. Pescatori, A. Messori, V. N. Madia, G. Pupo, F. Saccoliti, L. Scipione, S. Tortorella, F. S. Di Leva, S. Cosconati, E. Novellino, Z. Debyser, F. Christ, R. Costi, R. Di Santo. *Eur. J. Med. Chem.* 2015, 101, 288-294. *Il lavoro descrive una classe di composti N-aril-naftilamminici che viene riproposta per l'attività inibitrice nei confronti dell'interazione proteina-proteina tra l'integrasi del virus HIV-1 e la proteina LEDGF umana. Il lavoro è di buona qualità e pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).*
- 8) T. Schmid, J. S. Blees, M. M. Bajer, J. Wild, L. Pescatori, G. Cuzzucoli Crucitti, L. Scipione, R. Costi, C. J. Henrich, B. Brüne, N. H. Colburn, R. Di Santo. *Plos One*, 2016, 1-14. *Il lavoro descrive uno screening molecolare che porta alla scoperta di un derivato a struttura diarilsulfurea in grado di stabilizzare il soppressore tumorale ed inibitore della traduzione Pdc4. Lo studio, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 Multidisciplinary), apporta nuove conoscenze nel settore di interesse ed è condotto con rigore metodologico.*
- 9) A. Corona, F. S. Di Leva, G. Rigogliuso, L. Pescatori, V. N. Madia, F. Subra, O. Delelis, F. Esposito, M. Cadeddu, R. Costi, S. Cosconati, E. Novellino, R. Di Santo, E. Tramontano. *Antiv. Res.*, 2016, 134, 236-243. *Il lavoro riporta un confronto tra le interazioni intraprese da composti a struttura pirrolil-dichetoacida e il sito di legame dell'integrasi di HIV e della ribonucleasi H della trascrittasi inversa. La ricerca è scientificamente valida e fornisce informazioni utili per la progettazione di nuovi composti antiretrovirali attivi contro forme resistenti al raltegravir. Il lavoro è condotto con notevole rigore metodologico e pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1- Pharmacy).*
- 10) F. Saccoliti, G. Angiulli, G. Pupo, L. Pescatori, V. N. Madia, A. Messori, G. Colotti, A. Fiorillo, L. Scipione, M. Gramiccia, T. Di Muccio, R. Di Santo, R. Costi, A. Ilari. *J. Enz. Inhib. Med. Chem.*, 2017, 32, 304-310. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1), riporta la scoperta di un nuovo inibitore della tripanotione reductasi di *Leishmania infantum*, con dati strutturistici e caratterizzazione biochimica. Lo studio, condotto con buon rigore metodologico, riporta risultati di rilievo per lo sviluppo di nuovi antiprotozoari.*
- 11) V. N. Madia, R. Benedetti, M. L. Barreca, L. Ngo, L. Pescatori, A. Messori, G. Pupo, F. Saccoliti, S. Valente, A. Mai, L. Scipione, Y. G. Zheng, C. Tintori, M. Botta, V. Cecchetti, L. Altucci, R. Di Santo, R. Costi. *ChemMedChem*. 2017, 12, 1359-1368. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di buon livello (Q2), descrive lo studio SAR di una serie di composti a struttura base cinnamica che inibiscono l'enzima istone acetil transferasi p300. Lo studio è condotto con rigore metodologico e riporta interessanti risultati.*
- 12) F. Saccoliti, V. N. Madia, V. Tudino, A. De Leo, L. Pescatori, A. Messori, D. De Vita, L. Scipione, R. Brun, M. Kaiser, P. Maser, C. M. Calvet, G. K. Jennings, L. M. Podust, R. Costi, R. Di Santo. *Eur. J. Med. Chem.* 2018, 156, 53-60. *Il lavoro, pubblicato in una rivista*

di ottimo livello (Q1), riporta l'attività antiprotozoaria di alcuni antifungini azolici, con valutazione dell'attività in vivo. Lo studio, condotto con rigore metodologico, porta a risultati rilevanti nel settore dei farmaci antitripanosomiaci.

TESI DOTTORATO

Titolo: Synthesis and properties of Calix[n]arene receptors for the preparation of "active" organic-inorganic hybrid material. La tesi è relativa alla messa a punto di procedure sintetiche ed alla valutazione delle proprietà di calixareni, per il loro impiego in ambiti relativi alla chimica supramolecolare. La tesi descrive un'attività di ricerca condotta con rigore ed è di ottimo livello scientifico per i risultati riportati.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il candidato PESCATORI presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS e con Impact Factor, tesi di Dottorato, 1 domanda di brevetto, 1 Comunicazione orale e 4 poster a congressi.

Valutazione della produzione complessiva

Il candidato PESCATORI presenta pubblicazioni originali, innovative e di ottima rilevanza considerando il panorama scientifico internazionale. In esse si rileva un approccio metodologico rigoroso e in tematiche congruenti con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. La produzione globalmente è quantificabile in 28 pubblicazioni. Per le 28 pubblicazioni il candidato dichiara i seguenti indici bibliometrici (Scopus): $h_i = 12$; Citazioni totali = 340; Numero medio di citazioni per pubblicazione: 12,14; IF Totale (28 pubblicazioni) = 120,24. IF Medio: 4,294. Il candidato è presente come primo nome in una pubblicazione. Comunque, tenuto conto anche dell'attività scientifica globale sviluppata dal candidato stesso, la Commissione ritiene che vi siano evidenti elementi di giudizio per individuare il suo apporto alla progettazione e sintesi anche nelle pubblicazioni dove non è in evidenza. La produzione scientifica è globalmente eccellente, continua nel tempo e riportata su riviste a diffusione internazionale dotate di ottima collocazione editoriale e diffusione all'interno della comunità scientifica. Il candidato ha presentato 1 Comunicazione orale e 4 presentazioni poster a Congressi, ha ottenuto due finanziamenti come PI all'Università di Roma "La Sapienza" su progetti di "avvio alla ricerca" 2015 e 2016 e ha partecipato a due finanziamenti, PRIN 2008 e 2010-2011. Il candidato ha raggiunto pertanto un livello scientifico eccellente che lo pone in posizione di preminenza per ricoprire posizioni di rilievo nel campo della ricerca su tematiche specifiche del settore SSD CHIM/08. L'esperienza scientifica maturata dal candidato è congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

CANDIDATO: VETICA FABRIZIO

COMMISSARIO 1

Prof. Roberto Di Santo

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Naturali conseguito presso l'Università RWTH AACHEN Germania nel 2018.
2. Laurea Magistrale in Chimica conseguita presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2015.
3. Assistente didattico RWTH Aachen University, Aachen (Germania): Insegnamento e supervisione Laboratorio avanzato di chimica organica, CdL in Chimica e Chimica per l'insegnamento 10/2016–08/2017.

4. Seminari didattici "Chimica e Laboratorio" CdL Scienze Geologiche, Università degli Studi Roma Tre nel settembre 2014.
5. Borsa di studio per didattica della chimica, Università Roma Tre 04/2014–10/2014.
6. Borsa di studio presso l'Università Roma Tre, ottobre 2015.
7. Ricercatore a contratto presso RWTH Aachen University, Aachen (Germania) 01/02/2016–31/01/2018.
8. Research Scientist – Chimico, BASF SE, Ludwigshafen (Germania) 01/04/2018–alla data attuale.
9. Lettera di presentazione redatta dalla Prof. M. A. Loreta.
10. Lettera di presentazione redatta dalla Prof. D. Enders.
11. Comunicazioni a Congressi 1 orale e 1 poster; membro di comitato organizzatore di un simposio.
12. Assistant Editor della rivista Asymmetric Catalysis.

Valutazione dei titoli

Il candidato VETICA ha conseguito la Laurea Magistrale in Chimica nel 2015 presso l'Università di Roma "La Sapienza". Successivamente consegue il Dottorato di Ricerca in Scienze Naturali, con specializzazione in Chimica Organica presso l'Università RWTH AACHEN nel 2018. Il candidato ha svolto Seminari didattici presso l'Università degli Studi Roma Tre nel settembre 2014 dal titolo "Chimica e Laboratorio" nel CdL Scienze Geologiche. Successivamente come assistente didattico all'Università RWTH Aachen ha svolto attività di insegnamento e supervisione per il Laboratorio avanzato di chimica organica, nel CdL in Chimica e Chimica per l'insegnamento dal 10/2016 al 08/2017. Ha avuto Borsa di studio dal titolo "Progettazione e allestimento di esperimenti di didattica della chimica" da introdurre in piattaforma MIUR LS-OSA", Università degli Studi Roma Tre dal 04/2014 al 10/2014. Successivamente, nell'ottobre 2015, ha ottenuto una Borsa di studio dal titolo "Organocatalisi applicata alla sintesi di Pirrolo Benzodiazepine" presso lo stesso Ateneo. Durante il periodo di Dottorato di Ricerca ha ottenuto un contratto come Ricercatore presso l'Università RWTH Aachen, dal 01/02/2016 al 31/01/2018. Dopo questo periodo viene assunto come Research Scientist – Chimico, presso la BASF SE, in qualità di responsabile di laboratorio di ricerca e sviluppo nel dipartimento di Synthesis & Homogeneous Catalysis dal 01/04/2018–alla data attuale. Presenta la sua attività di ricerca con una comunicazione orale a Congresso e 1 poster. E' stato anche membro di Comitato Organizzatore di un Simposio presso la RWTH Aachen University e Assistant Editor della rivista Asymmetric Catalysis dal 03/2013 al 05/2017. Il candidato è presentato positivamente da due docenti, la Prof. Maria Antonietta Loreta e il Prof. Dieter Enders. L'analisi dei titoli prodotti dal candidato mette in luce un profilo curriculare di buon livello. L'attività è continua nel tempo, tuttavia il curriculum e la sua esperienza scientifica maturata in questi anni non è congruente con il SSD CHIM/08 oggetto del concorso né con linee di ricerca indicate nel bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

- 1) F. Vetica, A. Pelosi, A. Gambacorta, M. A. Loreto, M. Miceli, T. Gasperi Eur. J. Org. Chem. 2014, 9, 1899. *Il lavoro è riguarda la sintesi di 3-idrossi-benzofuranoni mediante reazione domino. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2- Chem, Organic) ma non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*
- 2) T. Gasperi, M. Orsini, F. Vetica, R. M. de Figueiredo. "Organocatalytic Asymmetric Multicomponent Reactions" Multicomponent Reactions: Concepts and Applications for Design and Synthesis (Eds Raquel P. Herrera, Eugenia Marqués Lopez), Wiley-VCH, Weinheim, 2015, Chapter 2. *Capitolo di libro riguardante le reazioni multicomponente*

(organocatalisi asimmetrica), pubblicato da Wiley, ma non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.

3) F. Vetica, R. M. de Figueiredo, M. Orsini, D. Tofani, T. Gasperi. *Synthesis* 2015, 47, 2139. *Il lavoro è una review che tratta le recenti applicazioni delle reazioni organo catalizzate attraverso la formazione di centri stereogenici quaternari. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 – Chem, Organic) ma non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*

4) S. Dochain, F. Vetica, R. Puttreddy, K. Rissanen, D. Enders *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016, 55, 16153; *Angew. Chem.* 2016, 128, 16387. *Il lavoro è una communication che riguarda l'uso di catalizzatori organici in combinazione con complessi del Lantanio per la sintesi asimmetrica di tricycli funzionalizzati. Il lavoro è pubblicato su una rivista di eccellente livello (Q1 Multidisciplinare) ma non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*

5) F. Vetica, R. M. de Figueiredo, E. Cupioli, M. Miceli, A. Gambacorta, M. A. Loreto, T. Gasperi. *Tetrahedron Lett.* 2016, 750. *Il lavoro riguarda la sintesi mediante reazione domino enantioselettiva organocatalizzata di modulatori del recettore GABAB. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic) congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 ma non è pertinente alle tematiche del bando.*

6) F. Vetica, J. Fronert, R. Puttreddy, K. Rissanen, D. Enders *Synthesis*, 2016, 48, 4451. *Il lavoro riguarda la sintesi di 4-ammino-isocromanoni per reazione intramolecolare di Mannich. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic) ma non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*

7) F. Vetica, P. Chauhan, S. Dochain, D. Enders. "Asymmetric organocatalytic synthesis of tetrahydropyrans and their application in total synthesis" *Chem. Soc. Rev.* 2017, 46, 1661. *Il lavoro è una mini-review che tratta i recenti avanzamenti nell'area della organo-catalisi asimmetrica. Il lavoro è pubblicato su una rivista di altissimo livello (Q1- Multidisciplinare) ma non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*

8) F. Vetica, S. Bailey, P. Chauhan, M. Turberg, A. Ghaur, G. Raabe, D. Enders. *Adv. Synth. Cat.*, 2017, 359, 3729. *Il lavoro è una comunicazione che riguarda la desimmetrizzazione di ciclopentendioni attraverso reazione di accoppiamento organocatalizzato. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 Chem, Organic) ma non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*

9) F. Vetica, P. Chauhan, S. Mahajan, G. Raabe, D. Enders *Synthesis*, 2018, 50, 1039. *Il lavoro riguarda la ossidrilazione di indoli attraverso organocatalisi asimmetrica. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic) non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*

10) Q. Liu, X.-Y. Chen, S. Li, F. Vetica, G. Raabe, D. Enders *Synthesis*, 2018, 50, 127. *Il lavoro riguarda la sintesi in due stadi di gamma-ammino esteri alfa-beta insaturi mediante reazione di cicloaddizione tra enali e nitroso composti Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic) non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il candidato VETICA presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 9 pubblicazioni con Impact Factor e n. 1 monografia, tutte censite sulla banca dati SCOPUS, 1 comunicazione orale e 1 poster a Congressi; 1 partecipazione come membro del comitato organizzatore di simposio.

Valutazione della produzione complessiva

Il candidato VETICA presenta pubblicazioni originali, innovative e nelle quali si denota rigore metodologico. Tali pubblicazioni presentano rilevanza considerando il panorama scientifico internazionale. La produzione è declinabile in 1 capitolo di libro, due review, 2 comunicazioni e 5 lavori. Su riviste di alto e altissimo impatto sono pubblicate la review e una comunicazione, mentre i 5 lavori ed un'altra comunicazione sono pubblicati su riviste di buon livello. La produzione non è congruente con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. Infatti essa si configura come totalmente aderente alle tematiche del settore di chimica organica dal momento che tutte le 9 pubblicazioni e la monografia presentate trattano dell'utilizzo di catalizzatori organici asimmetrici per la sintesi di composti organici. Quantitativamente e qualitativamente la produzione scientifica è buona e continua nel tempo su riviste a diffusione internazionale dotate di buona o ottima collocazione editoriale. Il candidato dichiara i seguenti indici bibliometrici: (a) $h\ index=5$; (b) numero di citazioni=95. L'apporto individuale è enucleabile dal momento che il candidato è primo nome in 7 di esse. Ha presentato una comunicazione orale e un poster a congressi ed è stato membro di comitato organizzatore di un Simposio. Le pubblicazioni presentate evidenziano che il candidato ha maturato una buona esperienza e una buona competenza specifica ma in ambiti di ricerca non attinenti alle tematiche del SSD CHIM/08. L'esperienza scientifica maturata dal candidato non è congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

COMMISSARIO 2

Prof. Pietro Campiglia

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Naturali conseguito presso l'Università RWTH AACHEN Germania nel 2018.
2. Laurea Magistrale in Chimica conseguita presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2015.
3. Assistente didattico RWTH Aachen University, Aachen (Germania): Insegnamento e supervisione Laboratorio avanzato di chimica organica, CdL in Chimica e Chimica per l'insegnamento 10/2016–08/2017.
4. Seminari didattici "Chimica e Laboratorio" CdL Scienze Geologiche, Università degli Studi Roma Tre nel settembre 2014.
5. Borsa di studio per didattica della chimica, Università Roma Tre 04/2014–10/2014.
6. Borsa di studio presso l'Università Roma Tre, ottobre 2015.
7. Ricercatore a contratto presso RWTH Aachen University, Aachen (Germania) 01/02/2016–31/01/2018.
8. Research Scientist – Chimico, BASF SE, Ludwigshafen (Germania) 01/04/2018–alla data attuale.
9. Lettera di presentazione redatta dalla Prof. M. A. Loreta.
10. Lettera di presentazione redatta dalla Prof. D. Enders.
11. Comunicazioni a Congressi 1 orale e 1 poster; membro di comitato organizzatore di un simposio.
12. Assistant Editor della rivista Asymmetric Catalysis.

Valutazione sui titoli

Il candidato Vetica ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze Naturali presso l'Università RWTH AACHEN, Germania nel 2018, trattando, apparentemente, argomenti di ricerca che risultano non inerenti il SSD oggetto del presente concorso. Una valutazione più accurata sulla tesi di Dottorato non è possibile, in mancanza del documento originale.

Le attività svolte dopo il dottorato, benchè di elevata rilevanza scientifica, come si evince anche dalle lettere di presentazione presentate come titoli, non presentano congruenza con il SSD oggetto del concorso e con le tematiche del bando Il candidato dichiara 1 comunicazione orale, 1 poster a congresso ed una partecipazione come membro del comitato organizzatore di un congresso. La rilevanza della sua attività scientifica è dimostrata dalla partecipazione all'editorial board della rivista Asymmetric Catalysis. Il giudizio in merito ai titoli presentati è molto buono, anche se non si riscontra particolare attinenza con il SSD oggetto del presente concorso.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

- 1) F. Vetica, A. Pelosi, A. Gambacorta, M. A. Loreto, M. Miceli, T. Gasperi Eur. J. Org. Chem. 2014, 9, 1899. *La pubblicazione concerne la sintesi di 3-idrossi-benzofuranoni mediante approccio domino. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2- Chem, Organic) ma assolutamente incongruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*
- 2) T. Gasperi, M. Orsini, F. Vetica, R. M. de Figueiredo. "Organocatalytic Asymmetric Multicomponent Reactions" Multicomponent Reactions: Concepts and Applications for Design and Synthesis (Eds Raquel P. Herrera, Eugenia Marqués Lopez), Wiley-VCH, Weinheim, 2015, Chapter 2. *Si tratta di un capitolo di libro inerente le reazioni multicomponent, di buonissima rilevanza in ambito scientifico, ma non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e del bando relativo al presente concorso.*
- 3) F. Vetica, R. M. de Figueiredo, M. Orsini, D. Tofani, T. Gasperi. Synthesis 2015, 47, 2139. *Questo lavoro è una review inerente le reazioni organo catalitiche condotte attraverso la formazione di centri stereogenici quaternari. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 – Chem, Organic) ma non è attinente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche descritte nel bando del presente concorso.*
- 4) S. Dochain, F. Vetica, R. Puttreddy, K. Rissanen, D. Enders Angew. Chem. Int. Ed. 2016, 55, 16153; Angew. Chem. 2016, 128, 16387. *La pubblicazione concerne l'uso di catalizzatori organici in combinazione con complessi del Lantanio per la sintesi asimmetrica di tricicli funzionalizzati. Il lavoro è pubblicato su una rivista di livello superiore (Q1 Multidisciplinare) ma si denota, nuovamente, l'incongruità con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*
- 5) F. Vetica, R. M. de Figueiredo, E. Cupioli, M. Miceli, A. Gambacorta, M. A. Loreto, T. Gasperi. Tetrahedron Lett. 2016, 750. *Nella pubblicazione è descritta la sintesi enantioselettiva mediante approccio domino di modulatori del recettore GABAB. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic) e presenta una buona congruità con le tematiche dell'SSD CHIM/08 benchè nessuna con le tematiche del bando.*
- 6) F. Vetica, J. Fronert, R. Puttreddy, K. Rissanen, D. Enders Synthesis, 2016, 48, 4451. *In questo lavoro si descrive la sintesi di 4-ammino-isocromanoni tramite reazione intramolecolare di Mannich. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic) ma resta l'incongruenza con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*
- 7) F. Vetica, P. Chauhan, S. Dochain, D. Enders. "Asymmetric organocatalytic synthesis of tetrahydropyrans and their application in total synthesis" Chem. Soc. Rev. 2017, 46, 1661. *Il lavoro è sotto forma di review concernente la tematica dell'organo-catalisi asimmetrica. Il lavoro è pubblicato su una rivista di altissimo livello (Q1- Multidisciplinare) ma non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*
- 8) F. Vetica, S. Bailey, P. Chauhan, M. Turberg, A. Ghaur, G. Raabe, D. Enders. Adv. Synth. Cat., 2017, 359, 3729. *Il lavoro è incentrato sull'uso di organo catalisi per la*

desimmetrizzazione di ciclopentendioni. Il lavoro è pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 Chem, Organic) ma non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.

9) F. Vetica, P. Chauhan, S. Mahajan, G. Raabe, D. Enders Synthesis, 2018, 50, 1039. *Il lavoro incentrato sui processi di ossidrilazione degli indoli mediante organo catalisi asimmetrica. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic) ma non è pertinente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 nè con le tematiche del bando.*

10) Q. Liu, X.-Y. Chen, S. Li, F. Vetica, G. Raabe, D. Enders Synthesis, 2018, 50, 127. *Il lavoro incentrato sulla sintesi di gamma-ammino esteri alfa-beta insaturi mediante reazioni di ciclo addizione. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic) non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il candidato VETICA presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 9 pubblicazioni con Impact Factor e n. 1 monografia, tutte censite sulla banca dati SCOPUS, 1 comunicazione orale e 1 poster a Congressi; 1 partecipazione come membro del comitato organizzatore di simposio.

Valutazione della produzione complessiva

Il candidato VETICA ha presentato a valutazione numero 10 pubblicazioni, su riviste a diffusione internazionale dotate di buona collocazione editoriale. In 7 di queste pubblicazioni risulta primo autore, 1 di esse è un capitolo di libro, 2 di esse review, mentre 8 presentano co-autori internazionali. La produzione scientifica è notevole e continua nell'arco temporale considerato, ma non attinente alle tematiche inerenti il SSD di riferimento per il presente concorso. Lo stesso dicasi per la comunicazione ed il poster presentati a congresso. La produzione complessiva è rappresentata da 1 capitolo di libro, due review, 2 comunicazioni e 5 lavori. Il candidato dichiara i seguenti indici bibliometrici: (a) h index=5; (b) numero di citazioni=95. Le pubblicazioni presentate evidenziano che il candidato ha maturato ottima esperienza e competenze in ambito scientifico benchè in tematiche non attinenti alle richieste nel bando del presente concorso.

COMMISSARIO 3

Prof.ssa Silvia Rivara

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Naturali conseguito presso l'Università RWTH AACHEN Germania nel 2018.
2. Laurea Magistrale in Chimica conseguita presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2015.
3. Assistente didattico RWTH Aachen University, Aachen (Germania): Insegnamento e supervisione Laboratorio avanzato di chimica organica, CdL in Chimica e Chimica per l'insegnamento 10/2016–08/2017.
4. Seminari didattici "Chimica e Laboratorio" CdL Scienze Geologiche, Università degli Studi Roma Tre nel settembre 2014.
5. Borsa di studio per didattica della chimica, Università Roma Tre 04/2014–10/2014.
6. Borsa di studio presso l'Università Roma Tre, ottobre 2015.
7. Ricercatore a contratto presso RWTH Aachen University, Aachen (Germania) 01/02/2016–31/01/2018.
8. Research Scientist – Chimico, BASF SE, Ludwigshafen (Germania) 01/04/2018–alla data attuale.

9. Lettera di presentazione redatta dalla Prof. M. A. Loreta.
10. Lettera di presentazione redatta dalla Prof. D. Enders.
11. Comunicazioni a Congressi 1 orale e 1 poster; membro di comitato organizzatore di un simposio.
12. Assistant Editor della rivista Asymmetric Catalysis.

Valutazione sui titoli

Il candidato VETICA ha conseguito la Laurea Magistrale in Chimica nel 2015 presso l'Università di Roma "La Sapienza" e nel 2018 il Dottorato di Ricerca in Scienze Naturali, con specializzazione in Chimica Organica, presso l'Università RWTH Aachen. Nel 2014 il candidato ha svolto seminari didattici presso l'Università degli Studi Roma Tre. Dal 10/2016 al 08/2017, in qualità di assistente didattico, ha svolto attività di insegnamento e supervisione nel CdL in Chimica e Chimica per l'insegnamento all'Università RWTH Aachen. E' stato titolare di due Borse di studio all'Università degli Studi Roma Tre dal 04/2014 al 10/2014 e nell'ottobre 2015. Durante il periodo di Dottorato di Ricerca ha ottenuto un contratto come Ricercatore presso l'Università RWTH Aachen, dal 01/02/2016 al 31/01/2018. In seguito, dal 01/04/2018 alla data attuale, è divenuto Research Scientist presso la BASF SE, in qualità di responsabile di laboratorio di ricerca e sviluppo nel dipartimento di Synthesis & Homogeneous Catalysis. Ha presentato la sua attività di ricerca con una comunicazione orale a congresso e 1 poster. E' stato membro del Comitato Organizzatore di un Simposio presso la RWTH Aachen University e Assistant Editor della rivista Asymmetric Catalysis dal 03/2013 al 05/2017. Il candidato ha presentato due lettere di merito da parte di due docenti, la Prof. Maria Antonietta Loreta e il Prof. Dieter Enders, che esprimono valutazioni positive.

L'analisi dei titoli prodotti dal candidato evidenzia un buon profilo curricolare, con una attività continua nel tempo. Il curriculum e l'esperienza scientifica maturata in questi anni non sono però congruenti con il SSD CHIM/08 oggetto del concorso. L'esperienza scientifica maturata dal candidato non è congruente con le linee di ricerca indicate nel bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

- 1) F. Vetica, A. Pelosi, A. Gambacorta, M. A. Loreto, M. Miceli, T. Gasperi Eur. J. Org. Chem. 2014, 9, 1899. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di buon livello (Q2- Chem, Organic), è relativo alla sintesi di 3-idrossi-benzofuranoni. Il lavoro è interessante da un punto di vista scientifico, ma non congruente con le tematiche del SSD CHIM/08 e con le linee di ricerca indicate nel bando.*
- 2) T. Gasperi, M. Orsini, F. Vetica, R. M. de Figueiredo. "Organocatalytic Asymmetric Multicomponent Reactions" Multicomponent Reactions: Concepts and Applications for Design and Synthesis (Eds Raquel P. Herrera, Eugenia Marqués Lopez), Wiley-VCH, Weinheim, 2015, Chapter 2. *Questo lavoro è un capitolo di libro riguardante le reazioni multicomponente. La pubblicazione non appare congruente con le tematiche del SSD CHIM/08 e non pertinente alle tematiche del bando.*
- 3) F. Vetica, R. M. de Figueiredo, M. Orsini, D. Tofani, T. Gasperi. Synthesis 2015, 47, 2139. *L'articolo è una rassegna sulle applicazioni dell'organocatalisi asimmetrica. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 – Chem, Organic), ma non congruente con le tematiche del SSD CHIM/08.*
- 4) S. Dochain, F. Vetica, R. Puttreddy, K. Rissanen, D. Enders Angew. Chem. Int. Ed. 2016, 55, 16153; Angew. Chem. 2016, 128, 16387. *Il lavoro è pubblicato su una rivista di eccellente livello (Q1 Multidisciplinare) e descrive l'applicazione di catalizzatori organici e complessi del Lantano per la sintesi asimmetrica di tricicli funzionalizzati. Il lavoro non è congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08.*

- 5) F. Vetica, R. M. de Figueiredo, E. Cupioli, M. Miceli, A. Gambacorta, M. A. Loreto, T. Gasperi. *Tetrahedron Lett.* 2016, 750. *Il lavoro, pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic), riporta la sintesi enantioselettiva organocatalizzata di modulatori del recettore GABA B. Il lavoro, seppure congruente con le tematiche del SSD CHIM/08, non è pertinente alle tematiche del bando.*
- 6) F. Vetica, J. Fronert, R. Puttreddy, K. Rissanen, D. Enders *Synthesis*, 2016, 48, 4451. *L'articolo, pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic), descrive la sintesi di 4-ammino-isocromanoni attraverso l'applicazione di una reazione di Mannich intramolecolare. Il lavoro non è congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08.*
- 7) F. Vetica, P. Chauhan, S. Dochain, D. Enders. "Asymmetric organocatalytic synthesis of tetrahydropyrans and their application in total synthesis" *Chem. Soc. Rev.* 2017, 46, 1661. *La rassegna, pubblicata su una rivista di altissimo livello (Q1- Multidisciplinare), tratta di aspetti relativi alla organo-catalisi asimmetrica di derivati tetraidropiranicici. Il lavoro non è tuttavia congruente con le tematiche del SSD CHIM/08 e non è pertinente alle linee di ricerca indicate nel bando.*
- 8) F. Vetica, S. Bailey, P. Chauhan, M. Turberg, A. Ghaur, G. Raabe, D. Enders. *Adv. Synth. Cat.*, 2017, 359, 3729. *L'articolo, pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 Chem, Organic), riporta la applicazione di reazioni di accoppiamento organocatalizzato nella desimmetrizzazione di ciclopentendioni. Il lavoro non è congruente con le tematiche del SSD CHIM/08 e non è coerente con le linee di ricerca indicate nel bando.*
- 9) F. Vetica, P. Chauhan, S. Mahajan, G. Raabe, D. Enders *Synthesis*, 2018, 50, 1039. *L'articolo, pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic), riporta l'applicazione della organocatalisi asimmetrica per la idrossialchilazione di derivati indolici. Il lavoro non è congruente con le tematiche del SSD CHIM/08 e non è coerente con le linee di ricerca indicate nel bando.*
- 10) Q. Liu, X.-Y. Chen, S. Li, F. Vetica, G. Raabe, D. Enders *Synthesis*, 2018, 50, 127. *L'articolo, pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic), riporta la sintesi di gamma-ammino esteri insaturi ottenuti per reazione di cicloaddizione tra enali e nitrosocomposti. Il lavoro è non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è coerente con le linee di ricerca indicate nel bando.*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato VETICA presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 9 pubblicazioni con Impact Factor e n. 1 monografia, censite sulla banca dati SCOPUS, 1 comunicazione orale e 1 poster a congressi; 1 partecipazione come membro del comitato organizzatore di simposio.

Valutazione sulla produzione complessiva

Il candidato VETICA presenta pubblicazioni originali, innovative e condotte con rigore metodologico. La produzione consiste in 1 capitolo di libro, 2 review, 2 comunicazioni e 5 lavori. Una review e una comunicazione sono pubblicate su riviste di elevato impatto, mentre i 5 lavori ed un'altra comunicazione sono pubblicati su riviste di buon livello. Tuttavia, gran parte della produzione scientifica del candidato è svolta nell'ambito della chimica organica, e non è congruente con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. La produzione scientifica è buona e continua nel tempo, pubblicata su riviste a diffusione internazionale dotate di buona o ottima collocazione editoriale. Il candidato dichiara i seguenti indici bibliometrici: (a) h index=5; (b) numero di citazioni=95. L'apporto individuale è facilmente enucleabile dal momento che il candidato è primo nome in 7 di esse. Inoltre il candidato ha presentato una comunicazione orale e un poster a congressi ed è stato membro di comitato organizzatore di un Simposio. Complessivamente il candidato ha maturato una buona esperienza, sebbene non attinente alle tematiche

inerenti il SSD CHIM/08. L'esperienza scientifica maturata dal candidato non è congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

GIUDIZIO COLLEGALE

TITOLI

1. Dottorato di Ricerca in Scienze Naturali conseguito presso l'Università RWTH AACHEN Germania nel 2018.
2. Laurea Magistrale in Chimica conseguita presso l'Università di Roma "La Sapienza" nel 2015.
3. Assistente didattico RWTH Aachen University, Aachen (Germania): Insegnamento e supervisione Laboratorio avanzato di chimica organica, CdL in Chimica e Chimica per l'insegnamento 10/2016–08/2017.
4. Seminari didattici "Chimica e Laboratorio" CdL Scienze Geologiche, Università degli Studi Roma Tre nel settembre 2014.
5. Borsa di studio per didattica della chimica, Università Roma Tre 04/2014–10/2014.
6. Borsa di studio presso l'Università Roma Tre, ottobre 2015.
7. Ricercatore a contratto presso RWTH Aachen University, Aachen (Germania) 01/02/2016–31/01/2018.
8. Research Scientist – Chimico, BASF SE, Ludwigshafen (Germania) 01/04/2018–alla data attuale.
9. Lettera di presentazione redatta dalla Prof. M. A. Loreta.
10. Lettera di presentazione redatta dalla Prof. D. Enders.
11. Comunicazioni a Congressi 1 orale e 1 poster; membro di comitato organizzatore di un simposio.
12. Assistant Editor della rivista Asymmetric Catalysis.

Valutazione dei titoli

Il candidato VETICA ha conseguito la Laurea Magistrale in Chimica nel 2015 presso l'Università di Roma "La Sapienza" e il Dottorato di Ricerca in Scienze Naturali, con specializzazione in Chimica Organica presso l'Università RWTH AACHEN nel 2018. Il candidato ha svolto seminari didattici presso l'Università degli Studi Roma Tre nel settembre 2014 e assistenza didattica all'Università RWTH Aachen dal 10/2016 al 08/2017. Ha avuto due borse di studio presso l'Università degli Studi Roma Tre dal 04/2014 al 10/2014 e nell'ottobre 2015. Durante il periodo di Dottorato di Ricerca ha ottenuto un contratto come Ricercatore presso l'Università RWTH Aachen, dal 01/02/2016 al 31/01/2018. Successivamente viene assunto come Research Scientist responsabile di laboratorio R&S presso la BASF dal 01/04/2018–alla data attuale. Ha presentato la sua attività di ricerca con 1 comunicazione orale e 1 poster a Congressi, è stato membro di Comitato Organizzatore di un Simposio presso la RWTH Aachen University, e Assistant Editor della rivista Asymmetric Catalysis dal 03/2013 al 05/2017. Il candidato è presentato positivamente da due docenti, la Prof. Maria Antonietta Loreta e il Prof. Dieter Enders. L'analisi dei titoli prodotti dal candidato mette in luce un profilo curriculare di buon livello. L'attività è continua nel tempo, tuttavia il curriculum e la sua esperienza scientifica maturata in questi anni non sono congruenti con il SSD CHIM/08 oggetto del concorso né con le tematiche indicate nel bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1) F. Vetica, A. Pelosi, A. Gambacorta, M. A. Loreto, M. Miceli, T. Gasperi Eur. J. Org. Chem. 2014, 9, 1899. *Il lavoro riguarda la sintesi di 3-idrossi-benzofuranoni mediante reazioni domino ed è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2- Chem, Organic). Non è*

congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.

2) T. Gasperi, M. Orsini, F. Vetica, R. M. de Figueiredo. "Organocatalytic Asymmetric Multicomponent Reactions" Multicomponent Reactions: Concepts and Applications for Design and Synthesis (Eds Raquel P. Herrera, Eugenia Marqués Lopez), Wiley-VCH, Weinheim, 2015, Chapter 2. *Capitolo di libro inerente le reazioni multicomponente, che ha ottima rilevanza in ambito scientifico, ma non è congruente le tematiche dell'SSD CHIM/08 e del bando relativo al presente concorso.*

3) F. Vetica, R. M. de Figueiredo, M. Orsini, D. Tofani, T. Gasperi. Synthesis 2015, 47, 2139. *Review che riporta le reazioni organo catalitiche condotte attraverso la formazione di centri stereogenici quaternari. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 – Chem, Organic) ma non è attinente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche descritte nel bando del presente concorso bando.*

4) S. Dochain, F. Vetica, R. Puttreddy, K. Rissanen, D. Enders Angew. Chem. Int. Ed. 2016, 55, 16153; Angew. Chem. 2016, 128, 16387. *La communication riporta l'uso di catalizzatori organici in combinazione con complessi del Lantanio utilizzati per realizzare la sintesi asimmetrica dicomposti triciclici variamente funzionalizzati. Il lavoro è pubblicato su una rivista di livello superiore (Q1 Multidisciplinare) ma si denota l'incongruità con le tematiche dell'SSD CHIM/08. Non è pertinente alle tematiche del bando.*

5) F. Vetica, R. M. de Figueiredo, E. Cupioli, M. Miceli, A. Gambacorta, M. A. Loreto, T. Gasperi. Tetrahedron Lett. 2016, 750. *Il lavoro riporta la sintesi di modulatori del recettore GABAB mediante approccio domino enantioselettivo. E' pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic) e presenta una buona congruità con le tematiche dell'SSD CHIM/08 benchè nessuna con le tematiche del bando.*

6) F. Vetica, J. Fronert, R. Puttreddy, K. Rissanen, D. Enders Synthesis, 2016, 48, 4451. *In questa pubblicazione è riportata la sintesi di 4-ammino-isocromanoni tramite reazione intramolecolare di Mannich. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic) ma non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08. Non è pertinente alle tematiche del bando.*

7) F. Vetica, P. Chauhan, S. Dochain, D. Enders. "Asymmetric organocatalytic synthesis of tetrahydropyrans and their application in total synthesis" Chem. Soc. Rev. 2017, 46, 1661. *La pubblicazione è una review sull'organo-catalisi asimmetrica. Il lavoro è pubblicato su una rivista di altissimo livello (Q1- Multidisciplinare) ma non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*

8) F. Vetica, S. Bailey, P. Chauhan, M. Turberg, A. Ghaur, G. Raabe, D. Enders. Adv. Synth. Cat., 2017, 359, 3729. *Il lavoro descrive la desimmetrizzazione di ciclopentendioni mediante organo catalisi. E' pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1 Chem, Organic) ma non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*

9) F. Vetica, P. Chauhan, S. Mahajan, G. Raabe, D. Enders Synthesis, 2018, 50, 1039. *Il lavoro incentrato sui processi di ossidrilazione degli indoli mediante organo catalisi asimmetrica. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic) ma non è pertinente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 nè con le tematiche del bando.*

10) Q. Liu, X.-Y. Chen, S. Li, F. Vetica, G. Raabe, D. Enders Synthesis, 2018, 50, 127. *La pubblicazione riguarda la sintesi di gamma-ammino esteri alfa-beta insaturi mediante reazioni di ciclo addizione. Il lavoro è pubblicato su una rivista di buon livello (Q2 Chem, Organic) non congruente con le tematiche dell'SSD CHIM/08 e non è pertinente alle tematiche del bando.*

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il candidato VETICA presenta alla valutazione una produzione scientifica pari a n. 9 pubblicazioni con Impact Factor e n. 1 monografia, tutte censite sulla banca dati SCOPUS, 1 comunicazione orale e 1 poster a Congressi; 1 partecipazione come membro del comitato organizzatore di simposio.

Valutazione della produzione complessiva

Il candidato VETICA presenta pubblicazioni originali, innovative e rilevanti considerando il panorama scientifico internazionale. Le ricerche riportate in esse sono condotte con rigore metodologico e la produzione è globalmente declinabile in 1 capitolo di libro, due review, 2 comunicazioni e 5 lavori. La review e una comunicazione sono pubblicate su riviste di alto e altissimo impatto mentre i 5 lavori ed una seconda comunicazione sono pubblicati su riviste di buon livello. Dall'analisi dei contenuti si evince che la produzione scientifica non è congruente con il SSD CHIM/08 per il quale è bandita la procedura. Infatti, la tematica affrontata nelle 9 pubblicazioni e nella monografia è quella dell'utilizzo di catalizzatori organici asimmetrici per la sintesi di composti organici che è totalmente aderente alle tematiche del settore chimica organica.

La produzione scientifica è buona e continua nel tempo su riviste a diffusione internazionale dotate di buona o ottima collocazione editoriale. Il candidato dichiara i seguenti indici bibliometrici: (a) h index=5; (b) numero di citazioni=95. L'apporto individuale è enucleabile dal momento che il candidato è primo nome in 7 di esse. Comunque la Commissione, anche basandosi su elementi quali il curriculum del candidato, ritiene che anche nelle pubblicazioni dove non è in evidenza, il candidato abbia dato un decisivo apporto alla sintesi. Il candidato ha presentato una comunicazione orale e un poster a congressi ed è stato membro di comitato organizzatore di un Simposio. Le pubblicazioni presentate evidenziano che il candidato ha maturato una buona competenza specifica ma in ambiti di ricerca non attinenti alle tematiche del SSD CHIM/08. Anche l'esperienza scientifica maturata dal candidato non è congruente con linee di ricerca indicate nel bando.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 19.00

Letto, confermato e sottoscritto.

Roma, 15.11.2018

Firma dei Commissari

Prof Roberto Di Santo

Prof. Pietro Campiglia

(collegato per via telematica)

Prof.ssa Silvia Rivara

(collegato per via telematica)