

CURRICULUM VITAE

Prof. Giuseppe Bifulco
Dipartimento di Farmacia
Università di Salerno
via Giovanni Paolo II, 132
84084 Fisciano (SA)
email:bifulco@unisa.it
tel:+39089969741

DETTAGLI PERSONALI

FORMAZIONE

□□ **Maturità scientifica** Giugno 1986, Liceo Scientifico Galilei, Napoli, votazione 50/60.

□□ **Laurea** in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche presso la Facoltà di Farmacia, Università di Napoli Federico II, il 16.12.91, votazione 110/110 con lode. Tesi sperimentale in Chimica Organica dal titolo "" relatore il prof. Luigi Minale.

Dottorato

□□ Dottorato di Ricerca in "Sostanze Naturali Farmacologicamente Attive" ciclo VIII (1992-1995), tutor Prof. Luigi Minale (Università degli Studi di Napoli "Federico II").

da novembre-1992 a novembre-1994 presso il Dipartimento di Chimica delle sostanze Naturali dell'Università di Napoli "Federico II.

da novembre-1994 a novembre-1995 presso il Department of Molecular Biology dello Scripps Research Institute, San Diego, California

Esperienze post-doc

□□ *Da marzo 1996 al giugno 1996* ha avuto un *Contratto di Collaborazione Scientifica* presso il Dipartimento di Chimica delle Sostanze Naturali di Napoli.

□□ *Da giugno 1996 a gennaio 1997* ha avuto un *Contratto di Collaborazione Scientifica* presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università di Salerno, nel gruppo del Prof. Raffaele Riccio.

□ *Da marzo 1997 a marzo 1999*, è stato *borsista post-dottorato* presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università di Salerno, nel gruppo del Prof. Raffaele Riccio.

ATTIVITA' DI RICERCA SVOLTA PRESSO ISTITUZIONI ESTERE:

da novembre 1994 ad Ottobre 1995 come *Ph.D. Student* presso il gruppo di ricerca del Prof. W.J. Chazin, Dept. of Molecular Biology, The Scripps Research Institute, La Jolla, USA. Dal *18-07-96 al 31-08-96* presso il gruppo di ricerca del Prof. K.C. Nicolaou Dept. of Chemistry, The Scripps Research Institute, La Jolla, USA. Infine il Prof. G. Bifulco è stato nuovamente invitato dal Prof. K.C. Nicolaou durante il bimestre luglio-agosto del 1998.

POSIZIONI ACCADEMICHE

□□ Dal *13 aprile 1999 al 1 aprile 2002* è stato *Ricercatore* in Chimica Organica (gruppo disciplinare CHIM/06) presso la Facoltà di Farmacia dell'Università di Salerno.

□□ Dal *13 aprile 2002 al 2 gennaio 2005* è stato *Ricercatore Confermato* in Chimica Organica presso la Facoltà di Farmacia dell'Università di Salerno.

□□ Dal *3 gennaio 2005 al 30 Settembre 2017* è *Professore Associato* in Chimica Organica presso la Facoltà di Farmacia (Dipartimento di Farmacia) dell'Università di Salerno.

□□ Dal *1 Ottobre 2017* è *Professore Ordinario* in Chimica Organica presso la Facoltà di Farmacia (Dipartimento di Farmacia) dell'Università di Salerno.

□□ **Insegnamento istituzionale:** Chimica Organica I per il Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche (10 CFU), Laboratorio di Spettroscopia Interpretativa Organica (5 CFU) presso il CdS in CTF, Dipartimento di Farmacia, Università di Salerno.

ATTIVITÀ DIDATTICA, DI DIDATTICA INTEGRATIVA E DI SERVIZIO AGLI STUDENTI

ATTIVITÀ DIDATTICA PRESSO CdL DEL DIPARTIMENTO DI FARMACIA (FACOLTÀ DI FARMACIA ante240)

1. Chimica Organica I per il Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche (10 CFU), Laboratorio di Spettroscopia Interpretativa Organica (5 CFU) presso il CdS in CTF, Dipartimento di Farmacia, Università di Salerno. dall'anno accademico 2016-2017 ad oggi.
2. Laboratorio di Spettroscopia Interpretativa Organica (5 CFU) presso il CdS in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, Dipartimento di Farmacia, Università di Salerno. dall'anno accademico 2014-2015 ad oggi.
3. Stereochimica (5 CFU) presso il CdS in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, Dipartimento di Farmacia, Università di Salerno. dall'anno accademico 2006-2007 al 2013/2014.
4. Chimica Organica (10 CFU) presso il CdS in Tecniche Erboristiche, Facoltà di Farmacia, Università di Salerno. dall'anno accademico 2003-2004 al 2005/2006.
5. Metodi Fisici in Chimica Organica presso il CdS in Farmacia, Facoltà di Farmacia, Università di Salerno per l'anno accademico 2002-2003.
6. Corso di Approfondimento di Chimica Generale presso il CdS in Farmacia nell'anno 2001/2002
7. Sintesi e Tecniche Speciali Organiche presso il CdS in Farmacia, Facoltà di Farmacia, Università di Salerno dall'anno accademico 2000-2001 al 2003/2004.
8. Esercitazioni di Chimica Organica presso il CdS in Farmacia, Facoltà di Farmacia, Università di Salerno dall'anno accademico 1999/2000 al 2002/2003.
9. Corso di Incentivazione di Chimica Organica presso il CdS in Tecniche Erboristiche, Facoltà di Farmacia, Università di Salerno nell'anno accademico 1999/2000
9. Esercitazioni di Metodi Fisici in Chimica Organica presso il CdS in Farmacia, Facoltà di Farmacia, Università di Salerno dall'anno accademico 1998/1999.

ATTIVITÀ DIDATTICA PER STUDENTI DI DOTTORATO E *POST DOC*

E' stato invitato a tenere una lezione dal titolo "Sintesi totale di prodotti naturali" al XXX Corso Estivo "A. Corbella"-*Seminari di Sintesi in Chimica Organica* a Gargnano (BS), tenutosi a giugno 2005 presso il palazzo Feltrinelli dell'Università degli Studi di Milano.

Ha più volte tenuto, sotto incarico del Coordinatore del Dottorato di Ricerca, dei seminari di perfezionamento per Dottorandi di Ricerca dell'Università di Salerno riguardante lo studio strutturale di biopolimeri mediante tecniche NMR multidimensionali e le tecniche teorico-applicative di NMR.

E' stato invitato a tenere una lezione dal titolo "Practical aspects of quantum mechanical calculation of NMR chemical shifts and coupling constants" al "COST D28: Training School and Annual Workshop" tenutosi in Ischia dal 19/10/05 al 22/10/05.

Ha fatto parte dal 2007 al 2010 del Comitato Scientifico della "Winter School on Physical Organic Chemistry", e nell'edizione tenutasi a Bressanone dal 11/01/2007 al 18/11/2007, ha presentato una lezione dal titolo "QM calculation of Chemical Shifts in the structural determination of medium size molecules"

E' stato invitato dal Prof. Maurizio Botta a tenere una lezione dal titolo "Metodi NMR per la determinazione della configurazione relativa di sostanze naturali biologicamente attive" nell'ambito del "VI Laboratorio di Metodologie Sintetiche in Chimica Farmaceutica" (Siena 11-16 febbraio 2007).

E' stato invitato dal Prof. Corrado Tringali a tenere un seminario (14/02/2008) riguardante "Metodi NMR per la determinazione della configurazione relativa di composti organici" per gli studenti del Dottorato in Scienze Chimiche dell'Università di Catania.

Ha tenuto una lezione intitolata "Structure determination of complex molecules via NMR and computational methods: theory and application" (30/01/2009) presso la Scuola di Dottorato Tematica METAMORPHOSE dell'Università di Mons su invito del Prof. Benoit Champagne.

LIBRI DIDATTICI, TRADUZIONI

Traduzione di due testi di chimica organica: Chimica Organica di J. G. Smith (Mc Graw Hill), e Chimica Organica di P. Y. Bruice, Chimica organica", 2a edizione italiana, EdiSES.

NOTIZIE GENERALI SULL'ATTIVITA' SCIENTIFICA

L'attività di ricerca del Prof. Bifulco si è incentrata su tre tematiche principali: la prima riguarda lo studio chimico di invertebrati marini, la seconda riguardante il riconoscimento molecolare, in particolare sullo studio del meccanismo di azione di molecole bioattive ad azione antitumorale e antinfiammatoria, e la terza riguarda lo sviluppo di nuove metodologie nell'analisi strutturale di molecole naturali mediante calcoli quantomeccanici e tecniche avanzate di risonanza magnetica nucleare. La prima tematica di ricerca è stata affrontata dal candidato sin dai suoi primi passi come ricercatore, nell'ambito di gruppi leader nella ricerca sulle sostanze naturali marine: prima con il gruppo del Prof. Minale a Napoli e poi con il gruppo del Prof. Riccio a Salerno. L'esperienza all'estero del Prof. Bifulco durante il corso del suo dottorato nel gruppo del Prof. W.J. Chazin (12 mesi) ha permesso che egli maturasse delle competenze specifiche nel campo della Risonanza Magnetica Nucleare su bpolimeri e cominciasse ad affrontare, in collaborazione con il gruppo diretto dal Prof. K.C. Nicolaou, degli studi strutturali riguardanti il riconoscimento farmaco-DNA mediante la combinazione di tecniche NMR e dinamica molecolare

Questi studi sono stati stimolati da un successivo periodo (dal 18 luglio al 30 agosto 1996) in cui il Prof. Bifulco è stato invitato allo Scripps Research Institute, La Jolla, CA, dal Prof. K.C. Nicolaou per approfondire il meccanismo di azione che regolava le interazioni tra un dimero sintetico dell'antibiotico antitumorale calicheamicina con il DNA. Nel bimestre luglio-agosto 1998 il Prof. Bifulco si è recato nuovamente allo Scripps Research Institute, sotto invito del Prof. Chazin per studiare le interazioni di un derivato di un altro composto antitumorale, la duocarmicina, con il DNA.

Più di recente il Prof. Bifulco, mettendo a frutto le competenze acquisite nel campo delle sostanze naturali e in quello dell'analisi strutturale mediante tecniche NMR, si è interessato dello sviluppo di tecniche avanzate per l'analisi conformazionale e configurazionale di composti organici naturali. Nell'ambito di questa tematica, il candidato ha autonomamente sviluppato diversi approcci innovativi volti alla risoluzione di problemi di indagine strutturale, e la loro applicazione a una serie di interessanti problemi riguardanti composti organici bioattivi. Un primo approccio è consistito nella convalida di strutture incognite mediante il calcolo *quantomeccanico* dei chemical shift di ^{13}C e il loro confronto con i dati di risonanza magnetica sperimentali. Inoltre, il candidato ha introdotto nel 2002 un metodo che è tuttora ampiamente utilizzato in numerosi gruppi di ricerca. Tale metodo consiste nella determinazione della stereochimica relativa di composti organici flessibili mediante analisi conformazionale condotta mediante metodi *quantomeccanici* e successivo calcolo di chemical shift di ^{13}C NMR. Attraverso il calcolo dei chemical shift eseguiti tenendo conto delle distribuzioni di Boltzmann dei diastereoisomeri e il loro confronto con i dati di risonanza magnetica sperimentali, questo metodo permette di assegnare la stereochimica relativa di composti organici e ha aperto una serie di nuove prospettive per ciò che riguarda la determinazione della stereochimica di prodotti naturali.

Studi stereochimici sono stati anche portati avanti dal candidato per quel che riguarda composti di origine sintetica, in particolar modo per le policiclizzazioni ossidative di polieni isoprenoidi promosse da RuO_4 , e per la determinazione della conformazione di calixareni attraverso mappe derivanti da calcoli quantomeccanici dei chemical shifts .

Successivamente è stato introdotto un metodo di determinazione della configurazione di molecole organiche flessibili mediante il calcolo delle costanti di accoppiamento omo ed etero nucleari e il loro confronto con i

dati sperimentali, utilizzato più volte in letteratura dall'autore e da altri gruppi di ricerca per l'indagine stereo strutturale di molecole incognite.

Risultati rilevanti ai fini dell'indagine stereo chimica e strutturale sono derivati dalla proposta di una equazione empirica per la determinazione delle costanti di accoppiamento carbonio idrogeno. Tale equazione, che si colloca accanto alle note equazioni di Karplus e Altona per le costanti omonucleari, è stata derivata dal candidato mediante calcoli quantomeccanici.

Infine, più di recente, il Prof. Bifulco ha presentato un metodo per la determinazione delle stereo strutture basato sia sul calcolo di parametri NMR che sulla determinazione di distanze ROE ad alta precisione, in collaborazione con il Prof. Butts dell'Università di Bristol

Nell'ambito di una collaborazione con il Dr. Thomas Williamson e il Dr. Gary Martin della Merck, USA, il Prof. Bifulco ha proposto un metodo strutturale all'avanguardia per la determinazione della configurazione relativa di composti organici basato sulla misura sperimentale e sul calcolo di costanti omonucleari $^1J_{CC}$ (carbonio-carbonio).

Oltre alla proposta dei metodi sopra elencati, il candidato ha applicato, nell'ambito di collaborazioni nazionali e internazionali, tali metodologie con successo su una serie di sostanze organiche naturali e di sintesi

Un'altra tematica recente portata avanti dal candidato consiste negli studi di progettazione e sintesi di molecole ad attività prevalentemente antinfiammatoria e antitumorale. In tali studi il Prof. Bifulco ha dato il suo contributo soprattutto sulla fase di design basata sullo studio di riconoscimento molecolare dei target biologici in esame. Il candidato ha affrontato per molti anni e continua ad affrontare il problema di molecole antitumorali che inibiscono l'enzima istone deacetilasi HDAC.

Di recente, per quel che riguarda il design e la sintesi di composti con potenziale attività antinfiammatoria e antitumorale, sono stati progettati e sintetizzati nuovi inibitori di mPGES-1, un nuovo e interessante target coinvolto nello sviluppo dei tumori e nell'infiammazione), di Bcl-X1, anch'esso un target importante coinvolto nei meccanismi dell'apoptosi, della proteina Hsp90, e del bromodomain BRD .

Sulla base dei risultati incoraggianti ottenuti sullo sviluppo di inibitori di mPGES-1, il candidato ha continuato a lavorare su questo target nell'ambito di un progetto AIRC finanziato nel 2102 (Investigator Grant Giuseppe Bifulco IG 12777 triennale per 195.000 euro) e di nuovo finanziato nel 2015 ((Investigator Grant Giuseppe Bifulco IG17440 triennale per 174.000 euro). Durante questo periodo sono stati sviluppati nuovi inibitori contenenti scaffold originali e sono state approfonditi gli aspetti relativi al riconoscimento molecolare del target in questione

Il candidato ha inoltre proseguito gli studi su molecole che interagiscono con il DNA. Per affrontare e analizzare in dettaglio i meccanismi alla base del riconoscimento molecolare di tali target, sono state impiegate tecniche di avanguardia basate su campi di forza empirici e tecniche di quanto meccanica, integrate con studi di Risonanza Magnetica Nucleare, ed è stata proposta una metodica originale per individuare il modo di legame mediante STD-NMR.

Nell'ambito dello studio di problemi inerenti il riconoscimento molecolare, il candidato ha di recente messo a punto una metodologia di "Inverse Virtual Screening". In tale metodologia è stato proposto un pannello di strutture di target antitumorali, sul quale è possibile saggiare dal punto di vista computazionale composti con potenziale attività antitumorale e riuscire a individuare il target biologico. Inoltre, l'applicazione degli studi di Inverse Virtual Screening è stata immediatamente dimostrata, in uno studio in collaborazione con la Prof. Bewley dell'NIH, per quanto riguarda il meccanismo d'azione della namalide e più di recente per mettere in evidenza il meccanismo di azione di 6-IPA.

PRINCIPALI COLLABORAZIONI INTERNAZIONALI

Prof. Walter Chazin (Vandebilt University, USA)

Prof. K.C. Nicolaou (The Scripps Research Institute, USA)

Prof. Dale Boger (The Scripps Research Institute, USA)

Dr. Gary Martin (Merck, USA)

Dr. Thomas Williamson (Merck, USA)

Prof. Annemieke Madder (Gent University, Belgium)
 Prof. Petri Tahtinen (University of Turku, Finland)
 Prof. Carole Bewley (NIH, USA)
 Dr. Alberto Plaza (Saarland University, Germany)
 Prof. Wen Zhang (Second Military Medical University, China)
 Prof Anil Bhushan (University of California – San Francisco USA)

PARAMETRI BIBLIOMETRICI QUANTITATIVI

Prodotti della ricerca totali

Articoli su Rivista JCR: 166
 Capitoli Libro 4
 TOTALE
 170
IF Totale =719.3 IF medio= 4.4

Prodotti della ricerca ultimi 10 anni

Articoli su Rivista JCR 104
 Capitoli Libro 3
 TOTALE
 107
IF Totale =470.7 IF medio= 4.5

Prodotti della ricerca ultimi 5 anni

Articoli su Rivista JCR
 55
 Capitoli Libro
 1
 TOTALE
 56
IF Totale =233.4 IF medio= 4.2

Parametri citazionali

	Citazioni	Media	h-index
Intera carriera	4391	26.4	33
Ultimi 10 anni	2273	21.4	26
Ultimi 5 anni	628	11.2	17

*Citazioni al 13 marzo 2017; per ciascuna pubblicazione è stato calcolato il valore Scopus.

ELENCO GLOBALE PUBBLICAZIONI SU RIVISTE SCIENTIFICHE

- 1 Bifulco, G.; Bruno, I.; Paloma, L. G.; Riccio, R. Edwardsolides A, B And C. New Sesquiterpenoid Lactones From The Mediterranean Octocoral *Maasella Edwardsi* *Natural Product Letters* **1993**, 3, 167.
- 2 Bifulco, G.; Bruno, I.; Minale, L.; Riccio, R. Novel HIV-inhibitory halistanol sulfates F-H from a marine sponge, *Pseudoaxinissa digitata* *Journal of Natural Products* **1994**, 57, 164.
- 3 Bifulco, G.; Bruno, I.; Minale, L.; Riccio, R.; Calignano, A.; Debitus, C. (±)-Gelliusines A and B, two diastereomeric brominated tris-indole alkaloids from a deep water new Caledonian marine sponge (*Gellius* or *Orina* sp.) *Journal of Natural Products* **1994**, 57, 1294.

- 4 Bifulco, G.; Bruno, I.; Minale, L.; Riccio, R.; Debitus, C.; Bourdy, G.; Vassas, A.; Lavayre, J. Bioactive prenylhydroquinone sulfates and a novel C 31 furanoterpene alcohol sulfate from the marine sponge, *Ircinia* sp *Journal of Natural Products* **1995**, *58*, 1444.
- 5 Bifulco, G.; Bruno, I.; Riccio, R.; Lavayre, J.; Bourdy, G. Further brominated bis- and tris-indole alkaloids from the deep-water New Caledonian marine sponge *Orina* sp *Journal of Natural Products* **1995**, *58*, 1254.
- 6 Iorizzi, M.; Bifulco, G.; De Riccardis, F.; Minale, L.; Riccio, R.; Zollo, F. Starfish saponins, part 53. A reinvestigation of the polar steroids from the starfish *Oreaster reticulatus*: Isolation of sixteen steroidal oligoglycosides and six polyhydroxysteroids *Journal of Natural Products* **1995**, *58*, 10.
- 7 Bifulco, G.; Galeone, A.; Gomez-Paloma, L.; Nicolaou, K. C.; Chazin, W. J. Solution structure of the head-to-head dimer of calicheamicin oligosaccharide domain and d(CGTAGGATATCCTACG) 2 *Journal of the American Chemical Society* **1996**, *118*, 8817.
- 8 Riccio, R.; Kinnel, R. B.; Bifulco, G.; Scheuer, P. J. Kakelokelose, a sulfated mannose polysaccharide with anti-HIV activity from the Pacific tunicate *Didemnum molle* *Tetrahedron Letters* **1996**, *37*, 1979.
- 9 Bifulco, G.; Galeone, A.; Nicolaou, K. C.; Chazin, W. J.; Gomez-Paloma, L. Solution structure of the complex between the head-to-tail dimer of calicheamicin γ 1</inf>(I) oligosaccharide and a DNA duplex containing d(ACCT) and d(TCCT) high-affinity binding sites *Journal of the American Chemical Society* **1998**, *120*, 7183.
- 10 Kragelund, B. B.; Jönsson, M.; Bifulco, G.; Chazin, W. J.; Nilsson, H.; Finn, B. E.; Linse, S. Hydrophobic core substitutions in calbindin D(9k): Effects on Ca²⁺ binding and dissociation *Biochemistry* **1998**, *37*, 8926.
- 11 Casapullo, A.; Bifulco, G.; Bruno, I.; Riccio, R. New bisindole alkaloids of the topsentin and hamacanthin classes from the Mediterranean marine sponge *Rhaphisia lacazei* *Journal of Natural Products* **2000**, *63*, 447.
- 12 Cutignano, A.; Bifulco, G.; Bruno, I.; Casapullo, A.; Gomez-Paloma, L.; Riccio, R. Dragmacidin F: A new antiviral bromoindole alkaloid from the mediterranean sponge *Halicortex* sp *Tetrahedron* **2000**, *56*, 3743.
- 13 Smith, J. A.; Bifulco, G.; Case, D. A.; Boger, D. L.; Gomez-Paloma, L.; Chazin, W. J. The structural basis for in Situ activation of DNA alkylation by duocarmycin SA *Journal of Molecular Biology* **2000**, *300*, 1195.
- 14 Bassarello, C.; Bifulco, G.; Evidente, A.; Riccio, R.; Gomez-Paloma, L. Stereochemical studies on ascaulitoxin: A J-based NMR configurational analysis of a nitrogen substituted system *Tetrahedron Letters* **2001**, *42*, 8611.
- 15 Bassarello, C.; Bifulco, G.; Zampella, A.; D'Auria, M. V.; Riccio, R.; Gomez-Paloma, L. Stereochemical studies on sphinxolide: Advances in the J-based NMR determination of the relative configuration of flexible systems *European Journal of Organic Chemistry* **2001**, *39*.
- 16 Casapullo, A.; Cutignano, A.; Bruno, I.; Bifulco, G.; Debitus, C.; Gomez-Paloma, L.; Riccio, R. Makaluvamine P, a new cytotoxic pyrroloiminoquinone from *Zyzya* cf. *fuliginosa* *Journal of Natural Products* **2001**, *64*, 1354.
- 17 Cimino, P.; Bifulco, G.; Casapullo, A.; Bruno, I.; Gomez-Paloma, L.; Riccio, R. Isolation and NMR characterization of rosacelose, a novel sulfated polysaccharide from the sponge *Mixylla rosacea* *Carbohydrate Research* **2001**, *334*, 39.
- 18 Cutignano, A.; Bruno, I.; Bifulco, G.; Casapullo, A.; Debitus, C.; Gomez-Paloma, L.; Riccio, R. Dactylolide, a new cytotoxic macrolide from the vanuatu sponge *Dactylospongia* sp *European Journal of Organic Chemistry* **2001**, *775*.
- 19 Randazzo, A.; Bifulco, G.; Giannini, C.; Bucci, M.; Debitus, C.; Cirino, G.; Gomez-Paloma, L. Halipeptins A and B: Two novel potent anti-inflammatory cyclic depsipeptides from the Vanuatu marine sponge *Haliclona* species *Journal of the American Chemical Society* **2001**, *123*, 10870.
- 20 Barone, G.; Duca, D.; Silvestri, A.; Gomez-Paloma, L.; Riccio, R.; Bifulco, G. Determination of the relative stereochemistry of flexible organic compounds by Ab initio methods: Conformational analysis and boltzmann-averaged GIAO 13C NMR chemical shifts *Chemistry - A European Journal* **2002**, *8*, 3240.

- 21 Barone, G.; Gomez-Paloma, L.; Duca, D.; Silvestri, A.; Riccio, R.; Bifulco, G. Structure validation of natural products by quantum-mechanical GIAO calculations of ^{13}C NMR chemical shifts *Chemistry - A European Journal* **2002**, *8*, 3233.
- 22 Bifulco, G.; Caserta, T.; Gomez-Paloma, L.; Piccialli, V. RuO $_4$ -promoted syn-oxidative polycyclization of isoprenoid polyenes: A new stereoselective cascade process *Tetrahedron Letters* **2002**, *43*, 9265.
- 23 Bifulco, G.; Smith, J. A.; Chazin, W. J.; Gomez-Paloma, L. In *Advances in DNA Sequence-Specific Agents* 2002; Vol. 4, p 47.
- 24 Ciasullo, L.; Casapullo, A.; Cutignano, A.; Bifulco, G.; Debitus, C.; Hooper, J.; Gomez-Paloma, L.; Riccio, R. Renieramide, a cyclic tripeptide from the Vanuatu sponge *Reniera n. sp* *Journal of Natural Products* **2002**, *65*, 407.
- 25 Cimino, P.; Bifulco, G.; Evidente, A.; Abouzeid, M.; Riccio, R.; Gomez-Paloma, L. Extension of the J-based configuration analysis to multiple conformer equilibria: An application to sapinofuranone A *Organic Letters* **2002**, *4*, 2779.
- 26 D'Acquarica, I.; Di Giovanni, M. C.; Gasparrini, F.; Misiti, D.; D'Arrigo, C.; Fagnano, N.; Guarnieri, D.; Iacono, G.; Bifulco, G.; Riccio, R. Isolation and structure elucidation of four new triterpenoid estersaponins from fruits of *Pittosporum tobira* AIT *Tetrahedron* **2002**, *58*, 10127.
- 27 Della Monica, C.; Randazzo, A.; Bifulco, G.; Cimino, P.; Aquino, M.; Izzo, I.; De Riccardis, F.; Gomez-Paloma, L. Structural revision of halipeptins: Synthesis of the thiazoline unit and isolation of halipeptin C *Tetrahedron Letters* **2002**, *43*, 5707.
- 28 Piacente, S.; Bifulco, G.; Pizza, C.; Stochmal, A.; Oleszek, W. A novel phenolic spiro derivative, Yuccaone A, from *Yucca schidigera* bark *Tetrahedron Letters* **2002**, *43*, 9133.
- 29 Zampella, A.; Bassarello, C.; Bifulco, G.; Gomez-Paloma, L.; D'Auria, M. V. Stereochemistry of sphinxolides and reidispongioides. Asymmetric synthesis of the C17-C22 fragment of reidispongioidide A *European Journal of Organic Chemistry* **2002**, 785.
- 30 Bassarello, C.; Cimino, P.; Bifulco, G.; Boger, D. L.; Smith, J. A.; Chazin, W. J.; Gomez-Paloma, L. NMR Structure of the (+)-CPI-indole/d(GACTAATTGAC)-d(GTCAATTAGTC) Covalent Complex *ChemBioChem* **2003**, *4*, 1188.
- 31 Bassarello, C.; Cimino, P.; Gomez-Paloma, L.; Riccio, R.; Bifulco, G. Simulation of 2D ^1H homo- and ^1H - ^{13}C heteronuclear NMR spectra of organic molecules by DFT calculations of spin-spin coupling constants and ^1H and ^{13}C -chemical shifts *Tetrahedron* **2003**, *59*, 9555.
- 32 Bifulco, G.; Caserta, T.; Gomez-Paloma, L.; Piccialli, V. RuO $_4$ -promoted oxidative polycyclization of isoprenoid polyenes. A further insight into the stereochemistry of the process *Tetrahedron Letters* **2003**, *44*, 5499.
- 33 Bifulco, G.; Caserta, T.; Gomez-Paloma, L.; Piccialli, V. Erratum: RuO $_4$ -promoted syn-oxidative polycyclization of isoprenoid polyenes: A new stereoselective cascade process (*Tetrahedron Letters* (2002) *43* (9265)) *Tetrahedron Letters* **2003**, *44*, 3429.
- 34 Bifulco, G.; Gomez-Paloma, L.; Riccio, R. Configurational analysis of the natural product passifloricin A by quantum mechanical ^{13}C NMR GIAO chemical shift calculations *Tetrahedron Letters* **2003**, *44*, 7137.
- 35 Plaza, A.; Bifulco, G.; Hamed, A. I.; Pizza, C.; Piacente, S. Argeloside A and B, two novel 14,15-secopregnane glycosides from *Solenostemma argel* *Tetrahedron Letters* **2003**, *44*, 8553.
- 36 Riccio, R.; Bifulco, G.; Cimino, P.; Bassarello, C.; Gomez-Paloma, L. Stereochemical analysis of natural products. Approaches relying on the combination of NMR spectroscopy and computational methods *Pure and Applied Chemistry* **2003**, *75*, 295.
- 37 Zampella, A.; Sepe, V.; D'Orsi, R.; Bifulco, G.; Bassarello, C.; D'Auria, M. V. Stereochemical assignment of the C23-C35 portion of sphinxolide/reidispongioidide class of natural products by asymmetric synthesis *Tetrahedron Asymmetry* **2003**, *14*, 1787.
- 38 Bassarello, C.; Lazzaroni, S.; Bifulco, G.; Lo Cantore, P.; Iacobellis, N. S.; Riccio, R.; Gomez-Paloma, L.; Evidente, A. Tolaasins A-E, five new lipodepsipeptides produced by *Pseudomonas tolaasii* *Journal of Natural Products* **2004**, *67*, 811.
- 39 Bifulco, G.; Bassarello, C.; Riccio, R.; Gomez-Paloma, L. Quantum mechanical calculations of NMR J coupling values in the determination of relative configuration in organic compounds *Organic Letters* **2004**, *6*, 1025.

- 40 Cimino, P.; Gomez-Paloma, L.; Duca, D.; Riccio, R.; Bifulco, G. Comparison of different theory models and basis sets in the calculation of ^{13}C NMR chemical shifts of natural products *Magnetic Resonance in Chemistry* **2004**, *42*.
- 41 Cimino, P.; Improta, R.; Bifulco, G.; Riccio, R.; Gomez-Paloma, L.; Barone, V. Nucleophilic Cyclopropane Ring Opening in Duocarmycin SA Derivatives by Methanol under Acid Conditions: A Quantum Mechanical Study in the Gas-Phase and in Solution *Journal of Organic Chemistry* **2004**, *69*, 2816.
- 42 Duca, D.; Bifulco, G.; Barone, G.; Casapullo, A.; Fontana, A. SCSA code: Applications on the cyclopeptide renieramide *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **2004**, *44*, 1024.
- 43 Izzo, I.; Della Monica, C.; Bifulco, G.; De Riccardis, F. Studies towards the total synthesis of contignasterol *Tetrahedron* **2004**, *60*, 5577.
- 44 Plaza, A.; Piacente, S.; Perrone, A.; Hamed, A.; Pizza, C.; Bifulco, G. Stemmosides C and D, two novel unusual pregnane glycosides from *Solenostemma argel*: Structural elucidation and configurational study by a combined NMR-quantum mechanical strategy *Tetrahedron* **2004**, *60*, 12201.
- 45 Terracciano, S.; Bruno, I.; Bifulco, G.; Copper, J. E.; Smith, C. D.; Gomez-Paloma, L.; Riccio, R. Synthesis, conformational analysis, and cytotoxicity of new analogues of the natural cyclodepsipeptide jaspamide *Journal of Natural Products* **2004**, *67*, 1325.
- 46 Ardá, A.; Rodríguez, J.; Nieto, R. M.; Bassarello, C.; Gomez-Paloma, L.; Bifulco, G.; Jiménez, C. NMR J-based analysis of nitrogen-containing moieties and application to dysithiazolamide, a new polychlorinated dipeptide from *Dysidea* sp *Tetrahedron* **2005**, *61*, 10093.
- 47 Bifulco, G.; Gomez-Paloma, L.; Riccio, R.; Gaeta, C.; Troisi, F.; Neri, P. Quantum mechanical calculations of conformationally relevant ^1H and ^{13}C NMR chemical shifts of calixarene systems *Organic Letters* **2005**, *7*, 5757.
- 48 Caserta, T.; Piccialli, V.; Gomez-Paloma, L.; Bifulco, G. RuO₄-catalyzed oxidative polycyclization of squalene. Determination of the configuration of the penta-tetrahydrofuran diol product *Tetrahedron* **2005**, *61*, 927.
- 49 Dambruoso, P.; Bassarello, C.; Bifulco, G.; Appendino, G.; Battaglia, A.; Fontana, G.; Gomez-Paloma, L. Advances in the Universal NMR Database approach. 2'-Substituted taxanes as probes for an improved protocol of diastereomeric differentiation *Organic Letters* **2005**, *7*, 983.
- 50 Dambruoso, P.; Bassarello, C.; Bifulco, G.; Appendino, G.; Battaglia, A.; Guerrini, A.; Fontana, G.; Gomez-Paloma, L. 2'-Methyl taxanes: Synthesis and NMR configurational assignment *Tetrahedron Letters* **2005**, *46*, 3411.
- 51 Di Micco, S.; Bassarello, C.; Bifulco, G.; Riccio, R.; Gomez-Paloma, L. Differential-frequency saturation transfer difference NMR spectroscopy allows the detection of different ligand-DNA binding modes *Angewandte Chemie - International Edition* **2005**, *45*, 224.
- 52 Plaza, A.; Perrone, A.; Balestrieri, C.; Balestrieri, M. L.; Bifulco, G.; Carbone, V.; Hamed, A.; Pizza, C.; Piacente, S. New antiproliferative 14,15-secopregnane glycosides from *Solenostemma argel* *Tetrahedron* **2005**, *61*, 7470.
- 53 Rodriguez, M.; Bassarello, C.; Bifulco, G.; Gomez-Paloma, L.; Mann, A.; Marchetti, M.; Schoenfelder, A.; Taddei, M. Synthesis of kainoids via a highly stereoselective hydroformylation of kainic acid *Synlett* **2005**, 1581.
- 54 Terracciano, S.; Bruno, I.; Bifulco, G.; Avallone, E.; Smith, C. D.; Gomez-Paloma, L.; Riccio, R. Synthesis, solution structure, and bioactivity of six new simplified analogues of the natural cyclodepsipeptide jaspamide *Bioorganic and Medicinal Chemistry* **2005**, *13*, 5225.
- 55 Bassarello, C.; Zampella, A.; Monti, M. C.; Gomez-Paloma, L.; D'Auria, M. V.; Riccio, R.; Bifulco, G. Quantum mechanical calculation of coupling constants in the configurational analysis of flexible systems: Determination of the configuration of callipeltin A *European Journal of Organic Chemistry* **2006**, 604.
- 56 Bruno, I.; Dambruoso, P.; Terracciano, S.; Bifulco, G. In *Seminars in Organic Synthesis* 2006; Vol. 15, p 289.
- 57 Cimino, P.; Bifulco, G.; Riccio, R.; Gomez-Paloma, L.; Barone, V. On the role of stereo-electronic effects in tuning the selectivity and rate of DNA alkylation by duocarmycins *Organic and Biomolecular Chemistry* **2006**, *4*, 1242.

- 58 Di Marzo, M.; Casapullo, A.; Bifulco, G.; Cimino, P.; Ligresti, A.; Di Marzo, V.; Riccio, R.; Gomez-Paloma, L. Synthesis, conformational analysis and CB 1 binding affinity of hairpin-like anandamide pseudopeptide mimetics *Journal of Peptide Science* **2006**, *12*, 575.
- 59 Izzo, I.; Maulucci, N.; Bifulco, G.; De Riccardis, F. Total synthesis of azumamides A and E *Angewandte Chemie - International Edition* **2006**, *45*, 7557.
- 60 Piccialli, V.; Caserta, T.; Caruso, L.; Gomez-Paloma, L.; Bifulco, G. RuO₄-mediated oxidative polycyclization of linear polyenes. A new approach to the synthesis of the bis-THF diol core of antitumour cis-cis adjacent bis-THF annonaceous acetogenins *Tetrahedron* **2006**, *62*, 10989.
- 61 Rodriquez, M.; Terracciano, S.; Cini, E.; Settembrini, G.; Bruno, I.; Bifulco, G.; Taddei, M.; Gomez-Paloma, L. Total synthesis, NMR solution structure, and binding model of the potent histone deacetylase inhibitor FR235222 *Angewandte Chemie - International Edition* **2006**, *45*, 423.
- 62 Sepe, V.; D'Orsi, R.; Borbone, N.; Valeria D'Auria, M.; Bifulco, G.; Monti, M. C.; Catania, A.; Zampella, A. Callipeltins F-I: New antifungal peptides from the marine sponge *Latrunculia* sp *Tetrahedron* **2006**, *62*, 833.
- 63 Bassarello, C.; Bifulco, G.; Montoro, P.; Skhirtladze, A.; Benidze, M.; Kemertelidze, E.; Pizza, C.; Piacente, S. *Yucca gloriosa*: A source of phenolic derivatives with strong antioxidant activity *Journal of Agricultural and Food Chemistry* **2007**, *55*, 6636.
- 64 Bassarello, C.; Bifulco, G.; Montoro, P.; Skhirtladze, A.; Kemertelidze, E.; Pizza, C.; Piacente, S. Gloriosols A and B, two novel phenolics from *Yucca gloriosa*: structural characterization and configurational assignment by a combined NMR-quantum mechanical strategy *Tetrahedron* **2007**, *63*, 148.
- 65 Bifulco, G.; Dambrosio, P.; Gomez-Paloma, L.; Riccio, R. Determination of relative configuration in organic compounds by NMR spectroscopy and computational methods *Chemical Reviews* **2007**, *107*, 3744.
- 66 Bifulco, G.; Riccio, R.; Gaeta, C.; Neri, P. Quantum mechanical calculations of conformationally relevant ¹H and ¹³C NMR chemical shifts of N-, O-, and S-substituted calixarene systems *Chemistry - A European Journal* **2007**, *13*, 7185.
- 67 D'Ursi, A.; Caliendo, G.; Perissutti, E.; Santagada, V.; Severino, B.; Albrizio, S.; Bifulco, G.; Spisani, S.; Temussi, P. A. Conformation - Activity relationship of peptide T and new pseudocyclic hexapeptide analogs *Journal of Peptide Science* **2007**, *13*, 413.
- 68 Manzo, E.; Gavagnin, M.; Bifulco, G.; Cimino, P.; Di Micco, S.; Ciavatta, M. L.; Guo, Y. W.; Cimino, G. Aplysiols A and B, squalene-derived polyethers from the mantle of the sea hare *Aplysia dactylomela* *Tetrahedron* **2007**, *63*, 9970.
- 69 Martino, L.; Virno, A.; Pagano, B.; Virgilio, A.; Di Micco, S.; Galeone, A.; Giancola, C.; Bifulco, G.; Mayol, L.; Randazzo, A. Structural and thermodynamic studies of the interaction of distamycin A with the parallel quadruplex structure [d(TGGGGT)]₄ *Journal of the American Chemical Society* **2007**, *129*, 16048.
- 70 Maulucci, N.; Chini, M. G.; Di Micco, S.; Izzo, I.; Cafaro, E.; Russo, A.; Gallinari, P.; Paolini, C.; Nardi, M. C.; Casapullo, A.; Riccio, R.; Bifulco, G.; De Riccardis, F. Molecular insights into azumamide E histone deacetylases inhibitory activity *Journal of the American Chemical Society* **2007**, *129*, 3007.
- 71 Rosselli, S.; Bruno, M.; Maggio, A.; Bellone, G.; Formisano, C.; Mattia, C. A.; Di Micco, S.; Bifulco, G. Two new flavonoids from *Bonannia graeca*: A DFT-NMR combined approach in solving structures *European Journal of Organic Chemistry* **2007**, 2504.
- 72 Troisi, F.; Russo, A.; Gaeta, C.; Bifulco, G.; Neri, P. Aramidocalix[4]arenes as new anion receptors *Tetrahedron Letters* **2007**, *48*, 7986.
- 73 Bifulco, G.; Mangoni, A. ¹H-¹H scalar coupling across two stacked aromatic rings: DFT calculations and experimental proof *Magnetic Resonance in Chemistry* **2008**, *46*, 199.
- 74 Chini, M. G.; Riccio, R.; Bifulco, G. DFT/NMR integrated approach: A valid support to the total synthesis of chiral molecules *Magnetic Resonance in Chemistry* **2008**, *46*, 962.
- 75 Di Micco, S.; Boger, D. L.; Riccio, R.; Bifulco, G. Structural features of the (+)-yatakemycin/d(GACTAATTGAC)-(GTCAATTAGTC) complex - Quantum mechanical calculation of NMR parameters as a tool for the characterization of ligand/DNA interactions *European Journal of Organic Chemistry* **2008**, 2454.

- 76 Di Micco, S.; Terracciano, S.; Bruno, I.; Rodriguez, M.; Riccio, R.; Taddei, M.; Bifulco, G. Molecular modeling studies toward the structural optimization of new cyclopeptide-based HDAC inhibitors modeled on the natural product FR235222 *Bioorganic and Medicinal Chemistry* **2008**, *16*, 8635.
- 77 Maulucci, N.; Izzo, I.; Bifulco, G.; Aliberti, A.; De Cola, C.; Comegna, D.; Gaeta, C.; Napolitano, A.; Pizza, C.; Tedesco, C.; Flot, D.; De Riccardis, F. Synthesis, structures, and properties of nine-, twelve-, and eighteen-membered N-benzyloxyethyl cyclic α -peptoids *Chemical Communications* **2008**, 3927.
- 78 Terracciano, S.; Bruno, I.; D'Amico, E.; Bifulco, G.; Zampella, A.; Sepe, V.; Smith, C. D.; Riccio, R. Synthetic and pharmacological studies on new simplified analogues of the potent actin-targeting Jaspamide *Bioorganic and Medicinal Chemistry* **2008**, *16*, 6580.
- 79 Chini, M. G.; Scrima, M.; D'Ursi, A. M.; Bifulco, G. Fibril aggregation inhibitory activity of the β -sheet breaker peptides: A molecular docking approach *Journal of Peptide Science* **2009**, *15*, 229.
- 80 De Cola, C.; Licen, S.; Comegna, D.; Cafaro, E.; Bifulco, G.; Izzo, I.; Tecilla, P.; De Riccardis, F. Size-dependent cation transport by cyclic α -peptoid ion carriers *Organic and Biomolecular Chemistry* **2009**, *7*, 2851.
- 81 Di Micco, S.; Vitale, R.; Pellecchia, M.; Rega, M. F.; Riva, R.; Basso, A.; Bifulco, G. Identification of lead compounds as antagonists of protein Bcl-x_L with a diversity-oriented multidisciplinary approach *Journal of Medicinal Chemistry* **2009**, *52*, 7856.
- 82 Filosa, R.; Peduto, A.; Di Micco, S.; Caprariis, P. d.; Festa, M.; Petrella, A.; Capranico, G.; Bifulco, G. Molecular modelling studies, synthesis and biological activity of a series of novel bisnaphthalimides and their development as new DNA topoisomerase II inhibitors *Bioorganic and Medicinal Chemistry* **2009**, *17*, 13.
- 83 Grolla, A. A.; Podestà, V.; Chini, M. G.; Di Micco, S.; Vallario, A.; Genazzani, A. A.; Canonico, P. L.; Bifulco, G.; Tron, G. C.; Sorba, G.; Pirali, T. Synthesis, biological evaluation, and molecular docking of Ugi products containing a zinc-chelating moiety as novel inhibitors of histone deacetylases *Journal of Medicinal Chemistry* **2009**, *52*, 2776.
- 84 Monti, M. C.; Chini, M. G.; Margarucci, L.; Tosco, A.; Riccio, R.; Bifulco, G.; Casapullo, A. The molecular mechanism of human group IIA phospholipase A2 inactivation by bolinaquinone *Journal of Molecular Recognition* **2009**, *22*, 530.
- 85 Plaza, A.; Bifulco, G.; Keffer, J. L.; Lloyd, J. R.; Baker, H. L.; Bewley, C. A. Celebesides A-C and theopapuamides B-D, depsipeptides from an Indonesian sponge that inhibit HIV-1 entry *Journal of Organic Chemistry* **2009**, *74*, 504.
- 86 Zarra, R.; Montesarchio, D.; Coppola, C.; Bifulco, G.; Di Micco, S.; Izzo, I.; De Riccardis, F. Design, synthesis, and hybridisation of water-soluble, peptoid nucleic acid oligomers tagged with thymine *European Journal of Organic Chemistry* **2009**, 6113.
- 87 Chini, M. G.; Terracciano, S.; Riccio, R.; Bifulco, G.; Ciao, R.; Gaeta, C.; Troisi, F.; Neri, P. Conformationally locked calixarene-based histone deacetylase inhibitors *Organic Letters* **2010**, *12*, 5382.
- 88 Colombano, G.; Travelli, C.; Galli, U.; Caldarelli, A.; Chini, M. G.; Canonico, P. L.; Sorba, G.; Bifulco, G.; Tron, G. C.; Genazzani, A. A. A novel potent nicotinamide phosphoribosyltransferase inhibitor synthesized via click chemistry *Journal of Medicinal Chemistry* **2010**, *53*, 616.
- 89 Di Micco, S.; Chini, M. G.; Riccio, R.; Bifulco, G. Quantum mechanical calculation of NMR parameters in the stereostructural determination of natural products *European Journal of Organic Chemistry* **2010**, 1411.
- 90 Masullo, M.; Bassarello, C.; Bifulco, G.; Piacente, S. Polyisoprenylated benzophenone derivatives from the fruits of *Garcinia cambogia* and their absolute configuration by quantum chemical circular dichroism calculations *Tetrahedron* **2010**, *66*, 139.
- 91 Palermo, G.; Riccio, R.; Bifulco, G. Effect of electronegative substituents and angular dependence on the heteronuclear spin-spin coupling constant $^3J_{C-H}$ an empirical prediction equation derived by density functional theory calculations *Journal of Organic Chemistry* **2010**, *75*, 1982.
- 92 Pirali, T.; Faccio, V.; Mossetti, R.; Grolla, A. A.; Di Micco, S.; Bifulco, G.; Genazzani, A. A.; Tron, G. C. Synthesis, molecular docking and biological evaluation as HDAC inhibitors of

cyclopeptide mimetics by a tandem three-component reaction and intramolecular [3+2] cycloaddition *Molecular Diversity* **2010**, *14*, 109.

93 Plaza, A.; Bifulco, G.; Masullo, M.; Lloyd, J. R.; Keffer, J. L.; Colin, P. L.; Hooper, J. N. A.; Bell, L. J.; Bewley, C. A. Mutremdamide A and koshikamides C-H, peptide inhibitors of HIV-1 entry from different theonella species *Journal of Organic Chemistry* **2010**, *75*, 4344.

94 Plaza, A.; Keffer, J. L.; Bifulco, G.; Lloyd, J. R.; Bewley, C. A. Chrysophaentins A-H, antibacterial bisdiarylbutene macrocycles that inhibit the bacterial cell division protein FtsZ *Journal of the American Chemical Society* **2010**, *132*, 9069.

95 Samorì, C.; Beretta, G. L.; Varchi, G.; Guerrini, A.; di Micco, S.; Basili, S.; Bifulco, G.; Riccio, R.; Moro, S.; Bombardelli, E.; Zunino, F.; Fontana, G. Structure-activity relationship study of 16a-thiocamptothecins: An integrated in vitro and in silico approach *ChemMedChem* **2010**, *5*, 2006.

96 Sepe, V.; D'Auria, M. V.; Bifulco, G.; Ummarino, R.; Zampella, A. Concise synthesis of AHMHA unit in perthamide C. Structural and stereochemical revision of perthamide C *Tetrahedron* **2010**, *66*, 7520.

97 Terracciano, S.; Chini, M. G.; Bifulco, G.; D'Amico, E.; Marzocco, S.; Riccio, R.; Bruno, I. Synthesis of new mono and bis amides projected as potential histone deacetylase (HDAC) inhibitors *Tetrahedron* **2010**, *66*, 2520.

98 Terracciano, S.; Di Micco, S.; Bifulco, G.; Gallinari, P.; Riccio, R.; Bruno, I. Synthesis and biological activity of cyclotrapeptide analogues of the natural HDAC inhibitor FR235222 *Bioorganic and Medicinal Chemistry* **2010**, *18*, 3252.

99 Cipriani, S.; Mencarelli, A.; Chini, M. G.; Distrutti, E.; Renga, B.; Bifulco, G.; Baldelli, F.; Donini, A.; Fiorucci, S. The bile acid receptor GPBAR-1 (TGR5) modulates integrity of intestinal barrier and immune response to experimental colitis *PLoS ONE* **2011**, *6*.

100 De Marino, S.; Sepe, V.; D'Auria, M. V.; Bifulco, G.; Renga, B.; Petek, S.; Fiorucci, S.; Zampella, A. Towards new ligands of nuclear receptors. Discovery of malaitasterol A, an unique bissecosterol from marine sponge *Theonella swinhoei* *Organic and Biomolecular Chemistry* **2011**, *9*, 4856.

101 De Marino, S.; Ummarino, R.; D'Auria, M. V.; Chini, M. G.; Bifulco, G.; Renga, B.; D'Amore, C.; Fiorucci, S.; Debitus, C.; Zampella, A. Theonellasterols and conicasterols from *Theonella swinhoei*. Novel marine natural ligands for human nuclear receptors *Journal of Medicinal Chemistry* **2011**, *54*, 3065.

102 De Simone, R.; Chini, M. G.; Bruno, I.; Riccio, R.; Mueller, D.; Werz, O.; Bifulco, G. Structure-based discovery of inhibitors of microsomal prostaglandin E₂ synthase-1, 5-lipoxygenase and 5-lipoxygenase-activating protein: Promising hits for the development of new anti-inflammatory agents *Journal of Medicinal Chemistry* **2011**, *54*, 1565.

103 Di Micco, S.; Mazué, F.; Daquino, C.; Spatafora, C.; Delmas, D.; Latruffe, N.; Tringali, C.; Riccio, R.; Bifulco, G. Structural basis for the potential antitumour activity of DNA-interacting benzo[k]xanthene lignans *Organic and Biomolecular Chemistry* **2011**, *9*, 701.

104 Festa, C.; De Marino, S.; Dauria, M. V.; Bifulco, G.; Renga, B.; Fiorucci, S.; Petek, S.; Zampella, A. Solomonsterols A and B from *Theonella swinhoei*. the first example of C-24 and C-23 sulfated sterols from a marine source endowed with a PXR agonistic activity *Journal of Medicinal Chemistry* **2011**, *54*, 401.

105 Festa, C.; De Marino, S.; Sepe, V.; D'Auria, M. V.; Bifulco, G.; Andrés, R.; Terencio, M. C.; Payá, M.; Debitus, C.; Zampella, A. Perthamides C-F, potent human antipsoriatic cyclopeptides *Tetrahedron* **2011**, *67*, 7780.

106 Festa, C.; De Marino, S.; Sepe, V.; D'Auria, M. V.; Bifulco, G.; Débitus, C.; Bucci, M.; Vellecco, V.; Zampella, A. Solomonamides A and B, new anti-inflammatory peptides from *Theonella swinhoei* *Organic Letters* **2011**, *13*, 1532.

107 Fiorucci, S.; Cipriani, S.; Mencarelli, A.; Baldelli, F.; Bifulco, G.; Zampella, A. Farnesoid x receptor agonist for the treatment of liver and metabolic disorders: Focus on 6-ethyl-CDCA *Mini-Reviews in Medicinal Chemistry* **2011**, *11*, 753.

108 Lauro, G.; Romano, A.; Riccio, R.; Bifulco, G. Inverse virtual screening of antitumor targets: Pilot study on a small database of natural bioactive compounds *Journal of Natural Products* **2011**, *74*, 1401.

- 109 Monti, M. C.; Chini, M. G.; Margarucci, L.; Riccio, R.; Bifulco, G.; Casapullo, A. The binding mode of cladocoran A to the human group IIA phospholipase A 2 *ChemBioChem* **2011**, *12*, 2686.
- 110 Sepe, V.; Bifulco, G.; Renga, B.; D'Amore, C.; Fiorucci, S.; Zampella, A. Discovery of sulfated sterols from marine invertebrates as a new class of marine natural antagonists of farnesoid-x-receptor *Journal of Medicinal Chemistry* **2011**, *54*, 1314.
- 111 Cheruku, P.; Plaza, A.; Lauro, G.; Keffer, J.; Lloyd, J. R.; Bifulco, G.; Bewley, C. A. Discovery and synthesis of namalide reveals a new anabaenopeptin scaffold and peptidase inhibitor *Journal of Medicinal Chemistry* **2012**, *55*, 735.
- 112 Chini, M. G.; De Simone, R.; Bruno, I.; Riccio, R.; Dehm, F.; Weinigel, C.; Barz, D.; Werz, O.; Bifulco, G. Design and synthesis of a second series of triazole-based compounds as potent dual mPGES-1 and 5-lipoxygenase inhibitors *European Journal of Medicinal Chemistry* **2012**, *54*, 311.
- 113 Chini, M. G.; Jones, C. R.; Zampella, A.; D'Auria, M. V.; Renga, B.; Fiorucci, S.; Butts, C. P.; Bifulco, G. Quantitative NMR-derived interproton distances combined with quantum mechanical calculations of ¹³C chemical shifts in the stereochemical determination of conicasterol F, a nuclear receptor ligand from *Theonella swinhoei* *Journal of Organic Chemistry* **2012**, *77*, 1489.
- 114 Cini, E.; Bifulco, G.; Menchi, G.; Rodriguez, M.; Taddei, M. Synthesis of enantiopure 7-substituted azepane-2-carboxylic acids as templates for conformationally constrained peptidomimetics *European Journal of Organic Chemistry* **2012**, 2133.
- 115 Dal Piaz, F.; Malafrente, N.; Romano, A.; Gallotta, D.; Belisario, M. A.; Bifulco, G.; Gualtieri, M. J.; Sanogo, R.; De Tommasi, N.; Pisano, C. Structural characterization of tetranortriterpenes from *Pseudocedrela kotschyi* and *Trichilia emetica* and study of their activity towards the chaperone Hsp90 *Phytochemistry* **2012**, *75*, 78.
- 116 Dal Piaz, F.; Vassallo, A.; Chini, M. G.; Cordero, F. M.; Cardona, F.; Pisano, C.; Bifulco, G.; de Tommasi, N.; Brandi, A. Natural iminosugar (+)-lentiginosine inhibits ATPase and chaperone activity of Hsp90 *PLoS ONE* **2012**, *7*.
- 117 De Marino, S.; Ummarino, R.; D'Auria, M. V.; Chini, M. G.; Bifulco, G.; D'Amore, C.; Renga, B.; Mencarelli, A.; Petek, S.; Fiorucci, S.; Zampella, A. 4-Methylenesterols from *Theonella swinhoei* sponge are natural pregnane-X-receptor agonists and farnesoid-X-receptor antagonists that modulate innate immunity *Steroids* **2012**, *77*, 484.
- 118 Festa, C.; De Marino, S.; D'Auria, M. V.; Deharo, E.; Gonzalez, G.; Deyssard, C.; Petek, S.; Bifulco, G.; Zampella, A. Gracilioethers E-J, new oxygenated polyketides from the marine sponge *Plakinastrella mamillaris* *Tetrahedron* **2012**, *68*, 10157.
- 119 Festa, C.; Lauro, G.; De Marino, S.; D'Auria, M. V.; Monti, M. C.; Casapullo, A.; D'Amore, C.; Renga, B.; Mencarelli, A.; Petek, S.; Bifulco, G.; Fiorucci, S.; Zampella, A. Plakilactones from the marine sponge *Plakinastrella mamillaris*. discovery of a new class of marine ligands of peroxisome proliferator-activated receptor γ *Journal of Medicinal Chemistry* **2012**, *55*, 8303.
- 120 Fiorucci, S.; Distrutti, E.; Bifulco, G.; D'Auria, M. V.; Zampella, A. Marine sponge steroids as nuclear receptor ligands *Trends in Pharmacological Sciences* **2012**, *33*, 591.
- 121 Lauro, G.; Masullo, M.; Piacente, S.; Riccio, R.; Bifulco, G. Inverse Virtual Screening allows the discovery of the biological activity of natural compounds *Bioorganic and Medicinal Chemistry* **2012**, *20*, 3596.
- 122 Margarucci, L.; Monti, M. C.; Chini, M. G.; Tosco, A.; Riccio, R.; Bifulco, G.; Casapullo, A. The Inactivation Mechanism of Human Group IIA Phospholipase A 2 by Scalarial *ChemBioChem* **2012**, *13*, 2259.
- 123 Plaza, A.; Garcia, R.; Bifulco, G.; Martinez, J. P.; Hüttel, S.; Sasse, F.; Meyerhans, A.; Stadler, M.; Müller, R. Aetheramides A and B, potent HIV-inhibitory depsipeptides from a myxobacterium of the new genus " *Aetherobacter* " *Organic Letters* **2012**, *14*, 2854.
- 124 Renga, B.; Mencarelli, A.; D'Amore, C.; Cipriani, S.; D'Auria, M. V.; Sepe, V.; Chini, M. G.; Monti, M. C.; Bifulco, G.; Zampella, A.; Fiorucci, S. Discovery that theonellasterol a marine sponge sterol is a highly selective FXR antagonist that protects against liver injury in cholestasis *PLoS ONE* **2012**, *7*.
- 125 Sepe, V.; Ummarino, R.; Dauria, M. V.; Chini, M. G.; Bifulco, G.; Renga, B.; Damore, C.; Debitus, C.; Fiorucci, S.; Zampella, A. Conicasterol E, a small heterodimer partner sparing farnesoid

- X receptor modulator endowed with a pregnane X receptor agonistic activity, from the marine sponge *Theonella swinhoei* *Journal of Medicinal Chemistry* **2012**, *55*, 84.
- 126 Sepe, V.; Ummarino, R.; D'Auria, M. V.; Lauro, G.; Bifulco, G.; D'Amore, C.; Renga, B.; Fiorucci, S.; Zampella, A. Modification in the side chain of solomonsterol A: Discovery of cholestan disulfate as a potent pregnane-X-receptor agonist *Organic and Biomolecular Chemistry* **2012**, *10*, 6350.
- 127 Sepe, V.; Ummarino, R.; D'Auria, M. V.; Tagliatela-Scafati, O.; De Marino, S.; D'Amore, C.; Renga, B.; Chini, M. G.; Bifulco, G.; Nakao, Y.; Fusetani, N.; Fiorucci, S.; Zampella, A. Preliminary structure-activity relationship on theonellasterol, a new chemotype of FXR antagonist, from the marine sponge *Theonella swinhoei* *Marine Drugs* **2012**, *10*, 2448.
- 128 Terracciano, S.; Chini, M. G.; Riccio, R.; Bruno, I.; Bifulco, G. Design, Synthesis, and Biological Activity of Hydroxamic Tertiary Amines as Histone Deacetylase Inhibitors *ChemMedChem* **2012**, *7*, 694.
- 129 Bifulco, G.; Riccio, R.; Martin, G. E.; Buevich, A. V.; Williamson, R. T. Quantum chemical calculations of ¹J CC coupling constants for the stereochemical determination of organic compounds *Organic Letters* **2013**, *15*, 654.
- 130 Cipriani, S.; Mencarelli, A.; Chini, M. G.; Distrutti, E.; Renga, B.; Bifulco, G.; Baldelli, F.; Donini, A.; Fiorucci, S. Erratum: The bile acid receptor GPBAR-1 (TGR5) modulates integrity of intestinal barrier and immune response to experimental colitis (PLoS ONE (2013) 8:1 DOI: 10.1371/annotation/55febddb-0209-4a48-9c14-23df882126a2) *PLoS ONE* **2013**, *8*.
- 131 Dal Piaz, F.; Cotugno, R.; Lepore, L.; Vassallo, A.; Malafrente, N.; Lauro, G.; Bifulco, G.; Belisario, M. A.; De Tommasi, N. Chemical proteomics reveals HSP70 1A as a target for the anticancer diterpene oridonin in Jurkat cells *Journal of Proteomics* **2013**, *82*, 14.
- 132 Di Micco, S.; Chini, M. G.; Terracciano, S.; Bruno, I.; Riccio, R.; Bifulco, G. Structural basis for the design and synthesis of selective HDAC inhibitors *Bioorganic and Medicinal Chemistry* **2013**, *21*, 3795.
- 133 Di Micco, S.; Zampella, A.; D'Auria, M. V.; Festa, C.; De Marino, S.; Riccio, R.; Butts, C. P.; Bifulco, G. Plakilactones G and H from a marine sponge. Stereochemical determination of highly flexible systems by quantitative NMR-derived interproton distances combined with quantum mechanical calculations of ¹³C chemical shifts *Beilstein Journal of Organic Chemistry* **2013**, *9*, 2940.
- 134 Festa, C.; D'Amore, C.; Renga, B.; Lauro, G.; De Marino, S.; D'Auria, M. V.; Bifulco, G.; Zampella, A.; Fiorucci, S. Oxygenated polyketides from plakinastrella mamillaris as a new chemotype of PXR agonists *Marine Drugs* **2013**, *11*, 2314.
- 135 Malafrente, N.; Sanogo, R.; Vassallo, A.; De Tommasi, N.; Bifulco, G.; Dal Piaz, F. Androstanes and pregnanes from *Trichilia emetica* ssp. *suberosa* J.J. de Wilde *Phytochemistry* **2013**, *96*, 437.
- 136 Maldini, M.; Di Micco, S.; Montoro, P.; Darra, E.; Mariotto, S.; Bifulco, G.; Pizza, C.; Piacente, S. Flavanocoumarins from *Guazuma ulmifolia* bark and evaluation of their affinity for STAT1 *Phytochemistry* **2013**, *86*, 64.
- 137 Pauwels, E.; Claeys, D.; Martins, J. C.; Waroquier, M.; Bifulco, G.; Speybroeck, V. V.; Madder, A. Accurate prediction of ¹H chemical shifts in interstrand cross-linked DNA *RSC Advances* **2013**, *3*, 3925.
- 138 Piaz, F. D.; Vassallo, A.; Temraz, A.; Cotugno, R.; Belisario, M. A.; Bifulco, G.; Chini, M. G.; Pisano, C.; De Tommasi, N.; Braca, A. A chemical-biological study reveals C₉-type iridoids as novel heat shock protein 90 (Hsp90) inhibitors *Journal of Medicinal Chemistry* **2013**, *56*, 1583.
- 139 Terracciano, S.; Chini, M. G.; Dal Piaz, F.; Vassallo, A.; Riccio, R.; Bruno, I.; Bifulco, G. Dimeric and trimeric triazole based molecules as a new class of Hsp90 molecular chaperone inhibitors *European Journal of Medicinal Chemistry* **2013**, *65*, 464.
- 140 Bukhari, S. N. A.; Lauro, G.; Jantan, I.; Bifulco, G.; Amjad, M. W. Pharmacological evaluation and docking studies of α,β -unsaturated carbonyl based synthetic compounds as inhibitors of secretory phospholipase A₂, cyclooxygenases, lipoxygenase and proinflammatory cytokines *Bioorganic and Medicinal Chemistry* **2014**, *22*, 4151.
- 141 Di Micco, S.; Renga, B.; Carino, A.; D'Auria, M. V.; Zampella, A.; Riccio, R.; Fiorucci, S.; Bifulco, G. Structural insights into Estrogen Related Receptor- β modulation: 4-Methylenesterols from *Theonella swinhoei* sponge as the first example of marine natural antagonists *Steroids* **2014**, *80*, 51.

- 142 Gong, J.; Sun, P.; Jiang, N.; Riccio, R.; Lauro, G.; Bifulco, G.; Li, T. J.; Gerwick, W. H.; Zhang, W. New steroids with a rearranged skeleton as (h)P300 inhibitors from the sponge theonella swinhoei *Organic Letters* **2014**, *16*, 2224.
- 143 Lauro, G.; Strocchia, M.; Terracciano, S.; Bruno, I.; Fischer, K.; Pergola, C.; Werz, O.; Riccio, R.; Bifulco, G. Exploration of the dihydropyrimidine scaffold for the development of new potential anti-inflammatory agents blocking prostaglandin E 2 synthase-1 enzyme (mPGES-1) *European Journal of Medicinal Chemistry* **2014**, *80*, 407.
- 144 Masullo, M.; Menegazzi, M.; Di Micco, S.; Beffy, P.; Bifulco, G.; Dal Bosco, M.; Novelli, M.; Pizza, C.; Masiello, P.; Piacente, S. Direct interaction of garcinol and related polyisoprenylated benzophenones of *Garcinia cambogia* fruits with the transcription factor STAT-1 as a likely mechanism of their inhibitory effect on cytokine signaling pathways *Journal of Natural Products* **2014**, *77*, 543.
- 145 Nadmid, S.; Plaza, A.; Lauro, G.; Garcia, R.; Bifulco, G.; Müller, R. Hyalachelins A-C, unusual siderophores isolated from the terrestrial myxobacterium *hyalangiium minutum* *Organic Letters* **2014**, *16*, 4130.
- 146 Scrima, M.; Lauro, G.; Grimaldi, M.; Di Marino, S.; Tosco, A.; Picardi, P.; Gazzero, P.; Riccio, R.; Novellino, E.; Bifulco, M.; Bifulco, G.; D'Ursi, A. M. Structural evidence of N6-isopentenyladenosine as a new ligand of farnesyl pyrophosphate synthase *Journal of Medicinal Chemistry* **2014**, *57*, 7798.
- 147 Spatafora, C.; Barresi, V.; Bhusainahalli, V. M.; Di Micco, S.; Musso, N.; Riccio, R.; Bifulco, G.; Condorelli, D.; Tringali, C. Bio-inspired benzo[k,l]xanthene lignans: Synthesis, DNA-interaction and antiproliferative properties *Organic and Biomolecular Chemistry* **2014**, *12*, 2686.
- 148 Chini, M. G.; Ferroni, C.; Cantone, V.; Dambrosio, P.; Varchi, G.; Pepe, A.; Fischer, K.; Pergola, C.; Werz, O.; Bruno, I.; Riccio, R.; Bifulco, G. Elucidating new structural features of the triazole scaffold for the development of mPGES-1 inhibitors *MedChemComm* **2015**, *6*, 75.
- 149 Chini, M. G.; Riccio, R.; Bifulco, G. Computational NMR methods in the stereochemical analysis of organic compounds: Are proton or carbon NMR chemical shift data more discriminating? *European Journal of Organic Chemistry* **2015**, *2015*, 1320.
- 150 Dal Piaz, F.; Ferro, P.; Vassallo, A.; Vasaturo, M.; Forte, G.; Chini, M. G.; Bifulco, G.; Tosco, A.; De Tommasi, N. Identification and mechanism of action analysis of the new PARP-1 inhibitor 2''-hydroxygenkwanol A *Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects* **2015**, *1850*, 1806.
- 151 Iranshahi, M.; Chini, M. G.; Masullo, M.; Sahebkar, A.; Javidnia, A.; Chitsazian Yazdi, M.; Pergola, C.; Koeberle, A.; Werz, O.; Pizza, C.; Terracciano, S.; Piacente, S.; Bifulco, G. Can Small Chemical Modifications of Natural Pan-inhibitors Modulate the Biological Selectivity? the Case of Curcumin Prenylated Derivatives Acting as HDAC or mPGES-1 Inhibitors *Journal of Natural Products* **2015**, *78*, 2867.
- 152 Maione, F.; Cantone, V.; Chini, M. G.; De Feo, V.; Mascolo, N.; Bifulco, G. Molecular mechanism of tanshinone IIA and cryptotanshinone in platelet anti-aggregating effects: An integrated study of pharmacology and computational analysis *Fitoterapia* **2015**, *100*, 174.
- 153 Masullo, M.; Cantone, V.; Cerulli, A.; Lauro, G.; Messano, F.; Russo, G. L.; Pizza, C.; Bifulco, G.; Piacente, S. Giffonins J-P, Highly Hydroxylated Cyclized Diarylheptanoids from the Leaves of *Corylus avellana* Cultivar "Tonda di Giffoni" *Journal of Natural Products* **2015**, *78*, 2975.
- 154 Picaud, S.; Strocchia, M.; Terracciano, S.; Lauro, G.; Mendez, J.; Daniels, D. L.; Riccio, R.; Bifulco, G.; Bruno, I.; Filippakopoulos, P. 9 H -purine scaffold reveals induced-fit pocket plasticity of the brd9 bromodomain *Journal of Medicinal Chemistry* **2015**, *58*, 2718.
- 155 Strocchia, M.; Terracciano, S.; Chini, M. G.; Vassallo, A.; Vaccaro, M. C.; Dal Piaz, F.; Leone, A.; Riccio, R.; Bruno, I.; Bifulco, G. Targeting the Hsp90 C-terminal domain by the chemically accessible dihydropyrimidinone scaffold *Chemical Communications* **2015**, *51*, 3850.
- 156 Terracciano, S.; Lauro, G.; Strocchia, M.; Fischer, K.; Werz, O.; Riccio, R.; Bruno, I.; Bifulco, G. Structural insights for the optimization of dihydropyrimidin-2(1 H)-one based mPGES-1 inhibitors *ACS Medicinal Chemistry Letters* **2015**, *6*, 187.
- 157 Bukhari, S. N. A.; Lauro, G.; Jantan, I.; Chee, C. F.; Amjad, M. W.; Bifulco, G.; Sher, H.; Abdullah, I.; Rahman, N. A. Anti-inflammatory trends of new benzimidazole derivatives *Future Medicinal Chemistry* **2016**, *8*, 1953.

158 Chini, M. G.; Malafrente, N.; Vaccaro, M. C.; Gualtieri, M. J.; Vassallo, A.; Vasaturo, M.; Castellano, S.; Milite, C.; Leone, A.; Bifulco, G.; De Tommasi, N.; Dal Piaz, F. Identification of Limonol Derivatives as Heat Shock Protein 90 (Hsp90) Inhibitors through a Multidisciplinary Approach *Chemistry - A European Journal* **2016**, *22*, 13236.

159 Di Micco, S.; Spatafora, C.; Cardullo, N.; Riccio, R.; Fischer, K.; Pergola, C.; Koeberle, A.; Werz, O.; Chalal, M.; Vervandier-Fasseur, D.; Tringali, C.; Bifulco, G. 2,3-Dihydrobenzofuran privileged structures as new bioinspired lead compounds for the design of mPGES-1 inhibitors *Bioorganic and Medicinal Chemistry* **2016**, *24*, 820.

160 Lauro, G.; Tortorella, P.; Bertamino, A.; Ostacolo, C.; Koeberle, A.; Fischer, K.; Bruno, I.; Terracciano, S.; Gomez-Monterrey, I. M.; Tauro, M.; Loiodice, F.; Novellino, E.; Riccio, R.; Werz, O.; Campiglia, P.; Bifulco, G. Structure-Based Design of Microsomal Prostaglandin E 2 Synthase-1 (mPGES-1) Inhibitors using a Virtual Fragment Growing Optimization Scheme *ChemMedChem* **2016**, *11*, 612.

161 Maione, F.; Cantone, V.; Pace, S.; Chini, M. G.; Bisio, A.; Romussi, G.; Pieretti, S.; Werz, O.; Koeberle, A.; Mascolo, N.; Bifulco, G. Anti-inflammatory and analgesic activity of carnosol and carnosic acid in vivo and in vitro and in silico analysis of their target interactions *British Journal of Pharmacology* **2016** (in press).

162 Sun, P.; Yu, Q.; Li, J.; Riccio, R.; Lauro, G.; Bifulco, G.; Kurtán, T.; Mándi, A.; Tang, H.; Li, T. J.; Zhuang, C. L.; Gerwick, W. H.; Zhang, W. Bissubvilides A and B, Cembrane-capnosane heterodimers from the soft coral sarcophyton subviride *Journal of Natural Products* **2016**, *79*, 2552.

163 Terracciano, S.; Chini, M. G.; Vaccaro, M. C.; Strocchia, M.; Foglia, A.; Vassallo, A.; Saturnino, C.; Riccio, R.; Bifulco, G.; Bruno, I. Identification of the key structural elements of a dihydropyrimidinone core driving toward more potent Hsp90 C-terminal inhibitors *Chemical Communications* **2016**, *52*, 12857.

164 Terracciano, S.; Chini, M. G.; Vaccaro, M. C.; Strocchia, M.; Foglia, A.; Vassallo, A.; Saturnino, C.; Riccio, R.; Bifulco, G.; Bruno, I. Correction: Identification of the key structural elements of a dihydropyrimidinone core driving toward more potent Hsp90 C-terminal inhibitors (Chemical Communications (2016) 52 (12857–12860) DOI: 10.1039/C6CC90506D) *Chemical Communications* **2016**, *52*, 13515.

165 Terracciano, S.; Foglia, A.; Chini, M. G.; Vaccaro, M. C.; Russo, A.; Dal Piaz, F.; Saturnino, C.; Riccio, R.; Bifulco, G.; Bruno, I. New dihydropyrimidin-2(1H)-one based Hsp90 C-terminal inhibitors *RSC Advances* **2016**, *6*, 82330.

166 Lauro, G.; Manfra, M.; Pedatella, S.; Fischer, K.; Cantone, V.; Terracciano, S.; Bertamino, A.; Ostacolo, C.; Gomez-Monterrey, I.; De Nisco, M.; Riccio, R.; Novellino, E.; Werz, O.; Campiglia, P.; Bifulco, G. Identification of novel microsomal prostaglandin E 2 synthase-1 (mPGES-1) lead inhibitors from Fragment Virtual Screening *European Journal of Medicinal Chemistry* **2017**, *125*, 278.

RESPONSABILITÀ E/O PARTECIPAZIONE SCIENTIFICA PER PROGETTI DI RICERCA INTERNAZIONALI E NAZIONALI

Responsabilità Scientifiche

Responsabile dell'unità di Salerno del Progetto di Ricerca Scientifico di Rilevante Interesse Nazionale (PRIN) -Annualità 2006- dal titolo “Metodologie e strategie sintetiche orientate alla creazione di diversità molecolare per la preparazione di molecole biologicamente attive”, coordinato a livello nazionale dal Prof. Luca Banfi (54000 euro)

Responsabile dell'unità di Salerno del Progetto di Ricerca Scientifico di Rilevante Interesse Nazionale (PRIN) -Annualità 2009 dal titolo “Metodologie sintetiche per la generazione di

diversità molecolare di rilevanza biologica”, coordinato a livello nazionale dal Prof. Luca Banfi (37639 euro)

Principal Investigator (PI) Associazione Italiana per la Ricerca sul Cancro (AIRC) 195000 euro 2012-2015 *Design, Virtual screening, and Synthesis of mPGES-1 inhibitors as new Anti-Inflammatory and Anti-Cancer drugs.* (AIRC IG 12777)

Principal Investigator (PI) Associazione Italiana per la Ricerca sul Cancro (AIRC) 174000 euro 2015-2018 *Identification and biological evaluation of optimized mPGES-1 inhibitors as Anti-Inflammatory/Anti-Cancer drugs* (AIRC IG 17440)

Partecipazione Scientifica

2001-2004 MIUR PRIN 01- Struttura e sintesi di sostanze naturali e di loro analoghi con attività citotossica ed antitumorale (Coordinatore Prof. Ernesto Fattorusso)

2003-2005 MIUR PRIN 03 - Struttura e sintesi di sostanze naturali e di loro analoghi con attività citotossica e antitumorale (Coordinatore Prof. Ernesto Fattorusso)

2017-2020 MIUR PRIN 15- Top-down and Bottom-up approach in the development of new bioactive chemical entities inspired on natural products scaffolds (Coordinatore Prof. Raffaele Riccio)

CONSEGUIMENTO DI RICONOSCIMENTI PER L'ATTIVITÀ SCIENTIFICA

Nel settembre del 2004, a Potenza, nell'ambito del XXX Convegno Nazionale della divisione di Chimica Organica, il Prof. Bifulco è stato insignito dalla Società Chimica Italiana (sez. Chimica Organica) della medaglia “G. Ciamician”, premio nazionale conferito a ricercatori “distintisi per ricerche di notevole originalità nel campo della Chimica Organica”.

RESPONSABILITÀ GESTIONALI DIPARTIMENTO FARMACIA

Presidente del Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche (2012-oggi)

Presidente della Commissione Didattica del Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche (2009-2012)

Membro del Collegio dei Docenti del Dottorato in Scienze Farmaceutiche dell'Università di Salerno

Presidente del Comitato del Dipartimento di Farmacia dell'Università di Salerno per la Risonanza Magnetica Nucleare (2005-2016)

Membro della commissione Web della Facoltà di Farmacia.

ALTRI IMPEGNI GESTIONALI

1. **Membro del Comitato Scientifico WISPOC** (European-Winter School on Physical Organic Chemistry (E-WiSPOC) – Bressanone – Italy dal 2007 al 2010)
2. **Membro del Comitato Organizzatore ISOS** (International Summer School on Organic Synthesis "A. Corbella"), per il periodo 2013-2016.
- 3 **Membro dell'Advisory Editorial Board della rivista: "Magnetic Resonance in Chemistry"**.
3. Revisore dei programmi di ricerca dell'Università degli Studi di Padova.
10. **Referee per le riviste:** *E' referee abituale di numerose riviste scientifiche ad alto indice d'impatto, come ad esempio JOC, JACS, JMedChem, Angewandte Chemie, Chemistry a European Journal, EurJoc, EurJMedChem, Nature, J. Med. Chem., Steroids, Marine Drugs, Org. Lett., Bioorg. Med. Chem., PLoS One, Tetrahedron etc.*