

**FORMATO EUROPEO
PER IL CURRICULUM
VITAE**



INFORMAZIONI PERSONALI

Nome **ALCARO STEFANO**
Indirizzo **PIAZZA SERRAVALLE 9**
Telefono **09613694197**
Fax
E-mail **alcaro@unicz.it**

Nazionalità

Data di nascita

ESPERIENZA LAVORATIVA

- Date (da – a) **17 GIUGNO 2011 AD OGGI**
• Nome e indirizzo del datore di lavoro
Università degli Studi Magna Græcia di Catanzaro.
• Tipo di azienda o settore
Istituzione accademica statale di didattica e ricerca universitarie.
• Tipo di impiego
Professore straordinario SSD CHIM/08 (Chimica Farmaceutica).
• Principali mansioni e responsabilità
Titolare del Corso di Chimica Farmaceutica Generale (Cdl in Farmacia) e responsabile del Laboratorio di Chimica Farmaceutica dell' Università degli Studi Magna Græcia di Catanzaro

- Date (da – a) **23 DICEMBRE 2002 – 16 GIUGNO 2011**
• Nome e indirizzo del datore di lavoro
Università degli Studi Magna Græcia di Catanzaro.
• Tipo di azienda o settore
Istituzione accademica statale di didattica e ricerca universitarie.
• Tipo di impiego
Professore associato SSD CHIM/08 (Chimica Farmaceutica).
• Principali mansioni e responsabilità
Titolare del Corso di Chimica Farmaceutica e Tossicologica I (Cdl in Farmacia) e responsabile del Laboratorio di Chimica Farmaceutica dell' Università degli Studi Magna Græcia di Catanzaro

- Date (da – a) **2 SETTEMBRE 1996- 22 DICEMBRE 2002**
• Nome e indirizzo del datore di lavoro
Università degli Studi di Reggio Calabria, dal 1999 Università degli Studi Magna Græcia di Catanzaro.
• Tipo di azienda o settore
Istituzione accademica statale di didattica e ricerca universitarie.
• Tipo di impiego
Ricercatore SSD CHIM/08 (Chimica Farmaceutica) ex C07X.
• Principali mansioni e responsabilità
Assistenza e docenza ai corsi di chimica farmaceutica. Attività di ricerca.

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

- Data **23 novembre 1995**
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione
Università degli Studi "La Sapienza" di Roma.
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio
Materie del settore chimico farmaceutico e farmacologico.

- Qualifica conseguita
- Livello nella classificazione nazionale (se pertinente)
- Data
- Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione
- Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio
- Qualifica conseguita
- Livello nella classificazione nazionale (se pertinente)
- Data
- Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione
- Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio
- Qualifica conseguita
- Livello nella classificazione nazionale (se pertinente)

Dottore di Ricerca in Farmacologia, Farmacognosia e Tossicologia.
Titolo della tesi: "Ricognizione Molecolare e Metodi Computazionali" .

18 luglio 1995
Università degli Studi "La Sapienza" di Roma.

Materie del settore chimico farmaceutico.

Laurea in Farmacia.
110 e lode

17 luglio 1990
Università degli Studi "La Sapienza" di Roma.

Materie del settore chimico farmaceutico.

Laurea in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche.
110 e lode

CAPACITÀ E COMPETENZE

PERSONALI

Acquisite nel corso della vita e della carriera ma non necessariamente riconosciute da certificati e diplomi ufficiali.

MADRELINGUA

ITALIANA

ALTRA LINGUA

Inglese

- Capacità di lettura

livello: eccellente

- Capacità di scrittura
- Capacità di espressione orale

livello: eccellente

livello: buono

CAPACITÀ E COMPETENZE RELAZIONALI

La frequenza di laboratori di ricerca esteri, in particolare negli USA, ha contribuito significativamente alla capacità relazionale con colleghi e persone di diversa formazione ed estrazione culturale.

Inoltre è coordinatore di svariati accordi di cooperazione Erasmus per l'Università degli Studi Magna Græcia di Catanzaro.

Le capacità organizzative sono state maturate in varie esperienze lavorative.

Il Prof. Stefano Alcaro ha organizzato le seguenti iniziative congressuali:

- "Prospettive di collaborazione scientifica tra le Facoltà di Farmacia delle Università di Reggio Calabria e "La Sapienza" di Roma: individuazione di nuovi temi di ricerca", Roccelletta di Borgia (CZ), 10 giugno 1997.
- "Prospettive di collaborazione scientifica tra le Facoltà di Farmacia delle Università di Catanzaro "Magna Græcia" e di Roma "La Sapienza": progetti di ricerca attivati.", Roccelletta di Borgia (CZ), 25 giugno 1998.
- "1st Magna Græcia Medicinal Chemistry Workshop on New perspectives in Drug Research", Copanello (CZ), 10-13 giugno 2001.
- "2nd Workshop on The state-of-the-art of Computational Chemistry in the Universities of Calabria and Basilicata", Campus Università degli Studi "Magna Græcia" di Catanzaro, località Germaneto, 5-6 febbraio 2004.
- "The deMon Developers 5th Annual Workshop", Tropea (VV), 1-5 maggio 2004.
- "International Conference on Theoretical Aspect of Catalysis" Tropea (VV), 25-30 giugno 2004.
- "Erbe mediche: dalla ricerca di base alle possibili applicazioni in terapia", Parghelia (VV), 8 luglio 2005.
- "Nuove Prospettive in Chimica Farmaceutica" secondo meeting, Campus Università degli Studi "Magna Græcia" di Catanzaro, località Germaneto, 16-17 maggio 2008.
- "La Chimica della Vita: da alimenti funzionali a principi attivi", Catanzaro 29-30 settembre 2011

Durante il periodo di attività presso la Facoltà di Farmacia e i Dipartimenti di afferenza presso l'Università degli Studi "Magna Græcia" di Catanzaro il prof. Alcaro ha ottenuto finanziamenti sui seguenti progetti di ricerca:

1997 Progetto NATO triennale dal titolo "Computer Modeling of Azinomycin / DNA Interaction" (CRG 970160) dal 1.04.1997 al 1.04.2000. La borsa NATO ha consentito tre visite del prof. Alcaro presso i Laboratori del prof. R. S. Coleman (Ohio-State University, Columbus, OH, USA): 15-28 giu 1997, 7-17 dic 1997, 28 mar – 4 apr 1999.

2001 Progetto annuale "Nuovi antitumorali a scheletro tassanico" presentato dall'industria farmaceutica INDENA S.p.A. al MURST e del quale il prof. Alcaro è stato responsabile scientifico dell'unità di ricerca di Chimica Computazionale.

2001 Progetto giovani annuale dal titolo "Studio computazionale delle interazioni tra molecole biologicamente attive ed acidi nucleici" CNRG0037AE dell'Agenzia 2000 del Consiglio Nazionale delle Ricerche del quale il prof. Alcaro è stato responsabile scientifico.

2002 Responsabile dell'unità di ricerca di chimica computazionale su "Nuovi ligandi bioattivi sul recettore dello Stem Cell Factor" nell'ambito del Progetto CLUSTER coordinato dal Prof. Salvatore Venuta.

2002 Progetto annuale "Studio computazionale su nuovi antitumorali analoghi della tiocolchicina", presentato dall'industria farmaceutica INDENA S.p.A. al MURST e del quale il prof. Alcaro è stato responsabile scientifico dell'unità di ricerca di Chimica Computazionale.

2003 Responsabile dell'unità operativa di chimica computazionale nell'ambito del progetto "Uso di tecnologie innovative per l'identificazione di bersagli molecolari nelle patologie neoplastiche sporadiche ed ereditarie" del Ministero della Salute.

2007 Responsabile dell'unità operativa di chimica farmaceutica di Catanzaro per Programmi di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale (PRIN 2007 codice 2007JERJPC_002) sul tema "Progettazione, sintesi e valutazione biologica di nuovi inibitori delle cicloossigenasi", durata 24 mesi a partire dal 22 settembre 2008.

2008 Responsabile dell'unità operativa di chimica farmaceutica di Catanzaro per progetti per il Fondo per gli Investimenti della Ricerca di Base (FIRB-IDEAS codice RBID082ATK_002) sul tema "Nuovi farmaci per la terapia anticancro mirata", durata 5 anni, decorrenza: 04/02/2009 .

2009 Responsabile dell'unità operativa di ricerca per conto terzi regolamentata dalla convenzione con la VIMEJO srl per sperimentazioni sul tema "Valutazione dell'attività nefrolitiasica dell'integratore alimentare naturale in forma di soluzione acquosa.

2009 Responsabile dell'unità operativa di chimica farmaceutica di Catanzaro per Programmi di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale (PRIN 2009 codice 2009MFRKZ8_002) sul tema "Progettazione razionale e sintesi di ligandi in grado di riconoscere acidi nucleici in conformazione a quadrupla elica", durata 24 mesi a partire dal 17 settembre 2011.

2013 Responsabile scientifico dell'unità operativa di chimica farmaceutica di Catanzaro per il progetto di formazione di sei mesi per personale ad alta qualificazione professionale per conto dell'azienda farmaceutica Dompè (L'Aquila) nell'ambito del progetto PON01_00862.

CAPACITÀ E COMPETENZE
TECNICHE

*Con computer, attrezzature specifiche,
macchinari, ecc.*

ESPERIENZE IN QUALITÀ DI
DOCENTE ESPERTO IN CORSI
PON IN PROGETTI ATTINENTI CON
IL SETTORE INFORMATICO

ALTRE CAPACITÀ E COMPETENZE

*Competenze non precedentemente
indicate.*

Competenze di programmazione scientifica avanzata in ambienti Fortran e CSH.

Ha partecipato come docente al corso PON di 30 ore dal titolo "I NUOVI SCENARI E LE GRANDI SFIDE DELLA RICERCA SCIENTIFICA" (codice c Progetto: C-1-FSE-2011-199) condotto presso l'Istituto "De Nobili" di Catanzaro dal 17.02.2012 al 09.05.2012 utilizzando la piattaforma informatica "Molecular Conceptor" installata presso l'aula informatica della Scuola.

Per l'Università degli Studi "Magna Græcia" di di Catanzaro ricopre i seguenti incarichi istituzionali:

dal lug 2004 Presidente della Commissione CIVR di Ateneo per l'area chimica relativa al triennio 2001-2003.

dal dic 2004 al 2011 Rappresentante per i professori di II fascia al Consiglio di Amministrazione.

dal dic 2007 Componente delle commissioni per l'Orientamento, Mobilità Internazionale, Lavoro & Impresa.

dal mag 2008 Referente per i corsi di azzeramento dei deficit formativi organizzati dalla Regione Calabria.

Stefano Alcaro svolge attività di referee per le seguenti riviste:

Journal of American Chemical Society

Journal of Medicinal Chemistry

Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters

Currents in Medicinal Chemistry

Chemical Biology & Drug Design

Journal of Solution Chemistry

Bioinformatics

Chemie.

Ha inoltre ricoperto il ruolo di valutatore di progetti scientifici e attività di ricerca nel 2006 per conto dell'International Institute of Molecular and Cell Biology of Warsaw (Polonia) e nel 2008 per conto della Fondazione Roma.

SINTESI DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La produzione scientifica di Stefano Alcaro si è concretizzata in oltre 110 pubblicazioni su riviste internazionali, 1 su riviste nazionali, 4 capitoli su libri, 2 volumi a diffusione internazionale, 79 poster e 30 comunicazioni orali presentati a Congressi nazionali e internazionali.

H-index = 23 (da Scopus, giugno 2013)

Impact factor totale > 370

LISTA DELLE PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE DEGLI ULTIMI 5 ANNI

1. Chimenti, F.; Secci, D.; Bolasco, A.; Chimenti, P.; Bizzarri, B.; Granese, A.; Carradori, S.; Yáñez, M.; Orallo, F.; Ortuso, F.; **Alcaro, S.** Synthesis, Molecular Modeling, and Selective Inhibitory Activity against Human Monoamine Oxidases of 3-Carboxamido-7-Substituted Coumarins *J. Med Chem.*, **2009**, *52*, 1935-1942.
2. Chimenti, F.; Fioravanti, R.; Bolasco, A.; Chimenti, P.; Secci, D.; Rossi, F.; Yáñez, M.; Orallo, F.; Ortuso, F.; **Alcaro, S.** Chalcones: A Valid Scaffold for Monoamine Oxidases Inhibitors *J. Med Chem.*, **2009**, *52*, 2818-2824.
3. Cirilli, R.; **Alcaro, S.**; Fioravanti, R.; Secci, D.; Fiore, S.; La Torre, F.; Ortuso, F. Unusual high enantioselectivity in high performance liquid chromatography using cellulose tris(4-methylbenzoate) as a chiral stationary phase *J. Chromatography A.*, **2009**, *1216*, 4673-4678
4. Caruso, A.; Garofalo, A.; Grande, F.; Aiello, F.; Anzini, M.; Ortuso, F.; **Alcaro, S.**; Panno, A. Saturnino, C.; Sinicropi, M. S. Synthesis and Biological Evaluation of 1,3-Indandione Derivatives as Acetylcholinesterase Inhibitors *Pharmacologyonline*, **2009**, *1*, 264-277.
5. Puertas, M.C.; Buzón, M.J.; Artese, A.; **Alcaro, S.**; Menendez-Arias, L.; Perno, C.F.; Clotet, B.; Ceccherini-Silberstein, F.; Martinez-Picado, J. Effect of the HIV-1 Reverse Transcriptase Polymorphism Leu-214 on Replication Capacity and Drug Susceptibility. *J. Virol*, **2009**, *83*, 7434-9
6. **Alcaro, S.**; Artese, A.; Ceccherini-Silberstein, F.; Ortuso, F.; Perno, C.F.; Sing, T.; Svicher, V. Molecular Dynamics and Free Energy Studies on the Wild-Type and Mutated HIV-1 Protease Complexed with Four Approved Drugs: Mechanism of Binding and Drug Resistance. *J Chem Inf Model*, **2009**, *49*, 1751-1761
7. Procopio, A.; **Alcaro, S.**; Nardi, M.; Oliverio, M.; Ortuso, F.; Sacchetta, P.; Pieragostino, D.; Sindona, G. Synthesis, biological evaluation, and molecular modeling of oleuropein and its semisynthetic derivatives as cyclooxygenase inhibitors *J. Agric. Food Chem.* **2009**, *57*, 11161-11167
8. **Alcaro, S.**; Artese, A.; Ceccherini-Silberstein, F.; Chiarella, V.; Dimonte, S.; Ortuso, F.; Perno, C.F. Computational analysis of Human Immunodeficiency Virus (HIV) type-1 reverse transcriptase crystallographic models based on significant conserved residues found in Highly Active Antiretroviral Therapy (HAART)-treated patients *Curr. Med. Chem.*, **2010**, *17*, 290-308
9. **Alcaro, S.**; Arcone, R.; Costa, G.; De Vita, D.; Iannone, M.; Ortuso, F.; Procopio, P.; Pasceri, R.; Rotiroti, D.; Scipione, L. Simple choline esters as potential anti-Alzheimer agents *Curr. Pharm. Des.*, **2010**, *16*, 692-697
10. Chimenti, F.; Fioravanti, R.; Bolasco, A.; Chimenti, P.; Secci, D.; Rossi, F.; Yáñez, M.; Orallo, F.; Ortuso, F.; **Alcaro, S.**; Cirilli, R.; Ferretti, R.; Sanna, M.L. A new series of flavones, thioflavones, and flavanones as selective monoamine oxidase-B inhibitors. *Bioorg Med Chem.* **2010**, *18*, 1273-1279
11. **Alcaro, S.**; Artese, A.; Iley, J. N.; Missailidis, S.; Ortuso, F.; Parrotta, L.; Pasceri, R.; Paduano, F.; Sissi, C.; Trapasso, F.; Vigorita, M. G. Rational Design, Synthesis, Biophysical and Antiproliferative Evaluation of Fluorenone Derivatives with DNA G-Quadruplex Binding Properties *ChemMedChem*, **2010**, *5*, 575-583
12. **Alcaro, S.**; Gaspar, A.; Ortuso, F.; Milhazes, N.; Orallo, F.; Uriarte, E.; Yáñez, M.; Borges, F. Chromone-2- and -3-carboxylic acids inhibit differently monoamine oxidases A and B. *Bioorg Med Chem. Lett* , **2010**, *20*, 2709-2712

13. Chimenti, F.; Secci, D.; Bolasco, A.; Chimenti, P.; Granese, A.; Carradori, S.; Maccioni, E.; Cardia, M.C.; Yáñez, M.; Orallo, F.; **Alcaro, S.**; Ortuso, F.; Cirilli, R.; Ferretti, R.; Distinto, S.; Kirchmair, J.; Langer, T. Synthesis, semipreparative HPLC separation, biological evaluation, and 3D-QSAR of hydrazothiazole derivatives as human monoamine oxidase B inhibitors. *Bioorg Med Chem.* **2010**, *18*, 5063–5070
14. Chimenti, F.; Bolasco, A.; Secci, D.; Chimenti, P.; Granese, A.; Carradori, S.; Yáñez, M.; Orallo, F.; Ortuso, F.; **Alcaro, S.** Investigations on the 2-thiazolyldiazine scaffold: synthesis and molecular modeling of selective human monoamine oxidase inhibitors. *Bioorg Med Chem.* **2010**, *18*, 5715-5723
15. **Alcaro, S.**; Artese, A.; Botta, M.; Zizzari, A.T.; Orallo, F.; Ortuso, F.; Schenone, S.; Brullo, C.; Yáñez, M. Hit identification and biological evaluation of anticancer pyrazolopyrimidines endowed with anti-inflammatory activity. *ChemMedChem*, **2010**, *5*, 1242-1246
16. Maccioni, E.; **Alcaro, S.**; Orallo, F.; Cardia, M.C.; Distinto, S.; Costa, G.; Yanez, M.; Sanna, M.L.; Vigo, S.; Meleddu, R.; Secci, D. Synthesis of new 3-aryl-4,5-dihydropyrazole-1-carbothioamide derivatives. An investigation on their ability to inhibit monoamine oxidase. *Eur J Med Chem.* **2010**, *45*, 4490-8.
17. Svicher, V.; Alteri, C.; Artese, A.; Forbici, F.; Santoro, M.M.; Schols, D.; Van Laethem, K.; **Alcaro, S.**; Costa, G.; Tommasi, C.; Zaccarelli, M.; Narciso, P.; Antinori, A.; Ceccherini-Silberstein, F.; Balzarini, J.; Perno, C.F. Different Evolution of Genotypic Resistance Profiles to Emtricitabine Versus Lamivudine in Tenofovir-Containing Regimens. *J Acquir Immune Defic Syndr.* **2010**, *55*, 336-344
18. Ceccherini-Silberstein, F.; Malet, I.; Fabeni, L.; Dimonte, S.; Svicher, V.; D'Arrigo, R.; Artese, A.; Costa, G.; Bono, S.; **Alcaro, S.**; d'Arminio Monforte, A.; Katlama, C.; Calvez, V.; Antinori, A.; Marcelin, A.G; Perno, C.F. Specific HIV-1 integrase polymorphisms change their prevalence in untreated versus antiretroviral-treated HIV-1-infected patients, all naive to integrase inhibitors. *J Antimicrob Chemother.* **2010**, *65*, 2305-2318
19. Fioravanti, R.; Bolasco, A.; Manna, F.; Rossi, F.; Orallo, F.; Yáñez, M.; Vitali, A.; Ortuso, F.; **Alcaro, S.** Synthesis and molecular modelling studies of prenylated pyrazolines as MAO-B inhibitors. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2010**, *20*, 6479–6482.
20. Fioravanti, R.; Bolasco, A.; Manna, F.; Rossi, F.; Orallo, F.; Ortuso, F.; **Alcaro, S.**; Cirilli, R. Synthesis and biological evaluation of N-substituted-3,5-diphenyl-2-pyrazoline derivatives as cyclooxygenase (COX-2) inhibitors. *Eur J Med Chem.* **2010**, *45*, 6135-6138
21. **Alcaro, S.**; Alteri, C.; Artese, A.; Ceccherini-Silberstein, F.; Costa, G.; Ortuso, F.; Parrotta, L.; Perno, C.F.; Svicher, V. Molecular and structural aspects of clinically relevant mutations related to the approved non-nucleoside inhibitors of HIV-1 reverse transcriptase *Drug Resistance Updates*, **2011**, *14*, 141-149
22. Gaspar, A.; Teixeira, F.; Uriarte, E.; Milhazes, N.; Melo, A.; Cordeiro, M.N.; Ortuso, F.; **Alcaro, S.**; Borges, F. Towards the Discovery of a Novel Class of Monoamine Oxidase Inhibitors: Structures, Properties, Activities and Docking Studies on Chromone Amides *ChemMedChem*, **2011**, *6*, 628 – 632
23. Svicher, V.; Alteri, C.; Artese, A.; Zhang, J.; Costa, G.; Mercurio, F.; D'Arrigo, R.; **Alcaro, S.**; Palù, G.; Clementi, M.; Zazzi, M.; Andreoni, M.; Antinori, A.; Lazzarin, A.; Ceccherini-Silberstein, F.; Perno, C.F. Identification and Structural Characterization of Novel Genetic Elements in HIV-1 - V3 Loop Regulating Co-Receptor Usage *Antiviral Therapy*, **2011**, *16*, 1035-1045
24. Desideri, N.; Bolasco, A.; Fioravanti, R.; Proietti Monaco L.; Orallo, F.; Yáñez, M.; Ortuso, F.; **Alcaro, S.** Homoisoflavonoids: natural scaffolds with potent and selective monoamine oxidase-B inhibition properties. *J. Med. Chem.*, **2011**, *54*, 2155-2164
25. **Alcaro, S.**; Artese, A.; Costa, G.; Distinto, S.; Ortuso, F.; Parrotta, L. Conformational studies and solvent-accessible surface area analysis of known selective DNA G-Quadruplex binders. *Biochimie.* **2011**, *93*, 1267-1274
26. Maccioni, E.; **Alcaro, S.**; Cirilli, R.; Vigo, S.; Cardia, M.C.; Sanna, M.L.; Meleddu, R.; Yanez, M.; Costa, G.; Casu, L.; Matyus, P.; Distinto, S. 3-Acetyl-2,5-diaryl-2,3-dihydro-1,3,4-oxadiazoles: a new scaffold for the selective inhibition of monoamine oxidase B. *J Med Chem.* **2011**, *54*, 6394-6398
27. Cirilli, R.; **Alcaro, S.**; Fioravanti, R.; Ferretti, R.; Bolasco, A.; Gallinella, B.; Faggi, C. A chromatographic study on the exceptional enantioselectivity of cellulose tris(4-methylbenzoate) towards C5-chiral 4,5-dihydro-(1H)-pyrazole derivatives. *J Chromatogr A* **2011**, *1218*, 5653-5657

28. Secci, D.; Carradori, S.; Bolasco, A.; Chimenti, P.; Yáñez, M.; Ortuso, F.; **Alcaro, S.** Synthesis and selective human monoamine oxidase inhibition of 3-carbonyl, 3-acyl, and 3-carboxyhydrazido coumarin derivatives. *Eur J Med Chem.* **2011**, *46*, 4846-52.
29. **Alcaro, S.**; Alteri, C.; Artese, A.; Ceccherini-Silberstein, F.; Costa, G.; Ortuso, F.; Bertoli, A.; Forbici, F.; Santoro, M.M.; Parrotta, L.; Flandre, P.; Masquelier, B.; Descamps, D.; Calvez, V.; Marcelin, A.G.; Perno, C.F.; Sing, T.; Svicher, V. Docking Analysis and Resistance Evaluation of Clinically Relevant Mutations Associated with the HIV-1 Non-nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors Nevirapine, Efavirenz and Etravirine. *ChemMedChem.* **2011**, *6*, 2203 – 2213
30. Gaspar, A.; Silva, T.; Yáñez, M.; Vina, D.; Orallo, F.; Ortuso, F.; Uriarte, E.; **Alcaro, S.**; Borges, F. Chromone, a privileged scaffold for the development of monoamine oxidase inhibitors. *J Med Chem.* **2011**, *54*, 5165-5173.
31. Anzini, M.; Valenti, S.; Braile, C.; Cappelli, A.; Vomero, S.; **Alcaro, S.**; Ortuso, F.; Marinelli, L.; Limongelli, V.; Novellino, E.; Betti, L.; Giannaccini, G.; Lucacchini, A.; Daniele, S.; Martini, C.; Ghelardini, C.; Mannelli, L.D.; Giorgi, G.; Mascia, M.P.; Biggio, G. New insight into the central benzodiazepine receptor-ligand interactions: design, synthesis, biological evaluation, and molecular modeling of 3-substituted 6-phenyl-4H-imidazo[1,5-a][1,4]benzodiazepines and related compounds. *J Med Chem.* **2011**, *54*, 5694-5711.
32. Distinto, S.; Yáñez, M.; **Alcaro, S.**; Cardia, M.C.; Gaspari, M.; Sanna, M.L.; Meleddu, R.; Ortuso, F.; Kirchmair, J.; Markt, P.; Bolasco, A.; Wolber, G.; Secci, D.; Maccioni, E. Synthesis and biological assessment of novel 2-thiazolylhydrazones and computational analysis of their recognition by monoamine oxidase B. *Eur J Med Chem.* **2012**, *48*, 284-295
33. **Alcaro, S.**; Costa, G.; Distinto, S.; Moraca, F.; Ortuso, F.; Parrotta, L.; Artese, A. The Polymorphisms of DNA G-Quadruplex investigated by Docking Experiments with Telomestatin Enantiomers. *Curr Pharm Des.* **2012**, *18*, 1867 -1872
34. Distinto, S.; Esposito, F.; Kirchmair, J.; Cardia, M.C.; Gaspari, M.; Maccioni, E.; **Alcaro, S.**; Markt, P.; Wolber, G.; Zinzula, L.; Tramontano, E. Identification of HIV-1 reverse transcriptase dual inhibitors by a combined shape-, 2D-fingerprint- and pharmacophore-based virtual screening approach. *Eur J Med Chem.* **2012**, *50*, 216-229
35. Doria, F.; Nadai, M.; Folini, M.; Di Antonio, M.; Germani, L.; Percivalle, C.; Sissi, C.; Zaffaroni, N.; **Alcaro, S.**; Artese, A.; Richter, S.N.; Freccero, M. Hybrid ligand-alkylating agents targeting telomeric G-quadruplex structures. *Org Biomol Chem.* **2012**, *10*, 2798-2806
36. **Alcaro, S.**; Bolasco, A.; Cirilli, R.; Ferretti, R.; Fioravanti, R.; Ortuso, F. Computer-Aided Molecular Design of Asymmetric Pyrazole Derivatives with Exceptional Enantioselective Recognition toward the Chiralcel OJ-H Stationary Phase. *J Chem Inf Model.* **2012**, *52*, 649-654
37. **Alcaro, S.** The impact of the G-quadruplex conformation in the development of novel therapeutic and diagnostic agents. *Curr Pharm Des* **2012**, *18*, 1867 -1872
38. Varela, C.; Tavares da Silva, E.J.; Amaral, C.; Correia da Silva, G.; Baptista, T.; **Alcaro, S.**; Costa, G.; Carvalho, R.A.; Teixeira, N.A.; Roleira, F.M. New structure-activity relationships of A- and D-ring modified steroidal aromatase inhibitors: design, synthesis, and biochemical evaluation. *J Med Chem.* **2012**, *55*, 3992-4002.
39. del Carmen Michelini, M.; Russo, N.; **Alcaro, S.**; Wozniak, L.A. Theoretical and structural studies on mechanism of the Stec reaction *Tetrahedron*, **2012**, *68*, 5554-5563
40. Cento, V.; Mirabelli, C.; Salpini, R.; Dimonte, S.; Artese, A.; Costa, G.; Mercurio, F.; Svicher, V.; Parrotta, L.; Bertoli, A.; Ciotti, M.; Di Paolo, D.; Sarrecchia, C.; Andreoni, M.; **Alcaro, S.**; Angelico, M.; Perno, C.F.; Ceccherini-Silberstein, F. HCV Genotypes Are Differently Prone to the Development of Resistance to Linear and Macrocyclic Protease Inhibitors *PLoSone*, **2012**, *7*, e39652
41. Paduano, F.; Ortuso, F.; Campiglia, P.; Raso, C.; Iaccino, E.; Gaspari, M.; Gaudio, E.; Mangone, G.; Carotenuto, A.; Bilotta, A.; Narciso, D.; Palmieri, C.; Agosti, V.; Artese, A.; Gomez-Monterrey, I.; Sala, M.; Cuda, G.; Iuliano, R.; Perrotti, N.; Scala, G.; Viglietto, G.; **Alcaro, S.**; Croce, C.M.; Novellino, E.; Fusco, A.; Trapasso, F. Isolation and Functional Characterization of Peptide Agonists of PTPRJ, a Tyrosine Phosphatase Receptor Endowed with Tumor Suppressor Activity. *ACS Chem Biol.* **2012**, *7*, 1666-76

42. Milelli, A.; Tumiatti, V.; Micco, M.; Rosini, M.; Zuccari, G.; Raffaghello, L.; Bianchi, G.; Pistoia, V.; Fernando Díaz, J.; Pera, B.; Trigili, C.; Barasoain, I.; Musetti, C.; Toniolo, M.; Sissi, C.; **Alcaro, S.**; Moraca, F.; Zini, M.; Stefanelli, C.; Minarini, A. Structure-activity relationships of novel substituted naphthalene diimides as anticancer agents. *Eur J Med Chem.* **2012**, *57*, 417-28
43. Cross, S.; Ortuso, F.; Baroni, M.; Costa, G.; Distinto, S.; Moraca, F.; **Alcaro, S.**; Cruciani, G. GRID-based three-dimensional pharmacophores II: PharmBench, a benchmark data set for evaluating pharmacophore elucidation methods. *J Chem Inf Model.* **2012**, *52*, 2599-608.
44. Desideri, N.; Fioravanti, R.; Proietti Monaco, L.; Biava, M.; Yáñez, M.; Ortuso, F.; **Alcaro, S.** 1,5-Diphenylpenta-2,4-dien-1-ones as potent and selective monoamine oxidase-B inhibitors. *Eur J Med Chem.* **2013**, *59*, 91-100.
45. **Alcaro, S.**; Chiodo, S. G.; Leopoldini, M.; Ortuso, F. On the antioxidant efficiency of oxovitisin, a new class of red wine pyranoanthocyanins, revealed through quantum mechanical investigations. *J Chem Inf Model.* **2013**, *53*, 66-75
46. Zhang, J.; Perno, C. F.; Chen, M.; Svicher, V.; Artese, A.; Costa, G.; Alteri, C.; Ortuso, F.; Parrotta, L.; Liu, Y.; Liu, C.; **Alcaro, S.** Detecting and understanding genetic and structural features in HIV-1 B subtype V3 underlying HIV-1 co-receptor usage. *Bioinformatics.* **2013**, *29*, 451-460
47. **Alcaro, S.**; Musetti, C.; Distinto, S.; Casatti, M.; Zagotto, G.; Artese, A.; Parrotta, L.; Moraca, F.; Costa, G.; Ortuso, F.; Maccioni, E.; Sissi, C. Identification and characterization of new DNA G-quadruplex binders selected by a combination of ligand and structure based virtual screening approaches. *J Med Chem.* **2013**, *56*, 843-855
48. Distinto, S.; Maccioni, E.; Meleddu, R.; Corona, A.; **Alcaro, S.**; Tramontano, E. Molecular Aspects of the RT/drug Interactions. Perspective of Dual Inhibitors. *Curr Pharm Des.*, **2013**, *19*, 1850-1859
49. Vernieri, E.; Gomez-Monterrey, I.; Milite, C.; Grieco, P.; Musella, S.; Bertamino, A.; Scognamiglio, I.; **Alcaro, S.**; Artese, A.; Ortuso, F.; Novellino, E.; Sala, M.; Campiglia, P. Design, Synthesis, and Evaluation of New Tripeptides as COX-2 Inhibitors. *Journal of Amino Acids*, **2013**, Article ID 606282, in press
50. Artese, A.; **Alcaro, S.**; Moraca, F.; Reina, R.; Ventura, M.; Costantino, G.; Beccari, A.R.; Ortuso, F. State-of-the-art and diffusion of Computational Tools for Drug Design Purposes: a Survey among Italian Academic and Industrial Institutions. *Future Med Chem.* **2013**, *5*, 907-927
51. Ortuso, F.; Paduano, F.; Carotenuto, A.; Gomez-Monterrey, I.; Bilotta, A.; Gaudio, E.; Sala, M.; Artese, A.; Vernieri, E.; Dattilo, V.; Iuliano, R.; Brancaccio, D.; Bertamino, A.; Musella, S.; **Alcaro, S.**; Grieco, P.; Perrotti, N.; Croce, C.; Novellino, E.; Fusco, A.; Campiglia, P.; Trapasso, F. Discovery of PTPRJ Agonist Peptides That Effectively Inhibit in Vitro Cancer Cell Proliferation and Tube Formation. *ACS Chem Biol.* **2013**, in press

Catanzaro, 12 giugno 2013