

Curriculum vitae di Giosuè Costa

Nato a Chiaravalle Centrale (CZ) il 26/11/1980.

Nel **2008** consegue la laurea in Farmacia con votazione di 110/110 e lode, discutendo una tesi sperimentale in Chimica farmaceutica dal titolo “*Sviluppo del metodo GBPM per il docking di composti di interesse chimico farmaceutico*”.

Nel **2012** consegue il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Farmaceutiche, discutendo una tesi dal titolo “*Computational studies applied to HIV-1 macromolecular targets and implication in rational drug design of new selective antiviral agents*”.

Nel **2012** è ricercatore FIRB-IDEAS RBID082ATK– presso la Facoltà di Farmacia dell’Università degli Studi “Magna Graecia” di Catanzaro – Progetto: Nuovi farmaci per la terapia anticancro mirata (Contratto Co.Co.Co).

Nel **2012** è vincitore dell’assegno di ricerca annuale dal titolo: “Composti naturali antitumorali e/o antivirali ad interazione selettiva su sequenze di DNA in conformazione di quadruplesso: identificazione ed ottimizzazione chimico-farmaceutica”, settore scientifico disciplinare CHIM/08 – Chimica Farmaceutica (D.R. n 630/26.07.2012).

Nel **2013** risulta vincitore dell’assegno di ricerca annuale, dal titolo: “Identificazione chemio informatica di nuovi alimenti funzionali”, settore scientifico disciplinare CHIM/08 – Chimica Farmaceutica (D.R. n. 937 del 28/10/2013).

Nel **2014** risulta vincitore dell’assegno di ricerca biennale, dal titolo: “Composti naturali antitumorali e/o antivirali ad interazione selettiva su sequenze di DNA in conformazione di quadruplesso: identificazione ed ottimizzazione chimico-farmaceutica”, settore scientifico disciplinare CHIM/08 – Chimica Farmaceutica dal (D.R. n. 1040 del 28/10/2014).

Nel **2014** riceve il premio “II Gran Galà della Ricerca” per la pubblicazione edita su *Molecules* (**2013**, *18*, 12051-12070).

Nel **2016**, l’articolo inviato in qualità di autore di riferimento e pubblicato sul volume n° 16 di *ChemMedChem* (doi:10.1002/cmdc.201600053), è stato selezionato dal comitato editoriale per la copertina della rivista (doi:10.1002/cmdc.201600393).

Nell’anno accademico **2016/2017** è docente dell’insegnamento di Chimica Farmaceutica e Tossicologica II SSD CHIM/08 – Chimica Farmaceutica presso il Corso di Laurea in Farmacia dell’Università “Magna Græcia” di Catanzaro.

Gli interessi scientifici riguardano l’applicazione di nuovi algoritmi computazionali, ed in particolare tecniche di *Virtual Screening*, per lo studio delle interazioni intermolecolari del tipo farmaco-recettore e la progettazione di potenziali farmaci ad azione antitumorale, antivirale, analgesica e antidepressiva. In ambito nutraceutico si occupa dell’identificazione di potenziali attività terapeutiche in prodotti naturali contenuti negli alimenti.

È coautore di **47** pubblicazioni *in extenso* su riviste scientifiche internazionali afferenti all’area chimico-farmaceutica e di **5** comunicazioni a Congressi nazionali.

Publicazioni su riviste scientifiche internazionali

1. Alcaro, S.; Arcone, R.; Costa, G.; De Vita, D.; Iannone, M.; Ortuso, F.; Procopio, A.; Pasceri, R.; Rotiroti, D.; Scipione, L. Simple Choline Esters as Potential Anti-Alzheimer Agents. *Curr. Pharm. Des.* **2010**, *16*, 692-697. [doi:10.2174/138161210790883796](https://doi.org/10.2174/138161210790883796)
2. Svicher, V.; Alteri, C.; Artese, A.; Forbici, F.; Santoro, M. M.; Schols, D.; Van Laethem, K.; Alcaro, S.; Costa, G.; Tommasi, C.; Maccarelli, 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. *JAIDS* **2010**, *55*, 336-344. [doi:10.1097/QAI.0b013e3181e6763f](https://doi.org/10.1097/QAI.0b013e3181e6763f)
3. 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 FAD-aminoxidase. *Eur. J. Med. Chem.* **2010**, *45*, 4490-4498. [doi:10.1016/j.ejmech.2010.07.009](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2010.07.009)
4. Ceccherini-Silberstein, F.; Maletb, I.; Fabenia, L.; Dimontea, S.; Svicher, V.; D'Arrigo, R.; Artese, A.; Costa, G.; Bono, S.; Alcaro, S.; d'Arminio Manforte, A.; Katlamaf, 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 naïve to integrase inhibitors. *J. Antimicrob. Chemother.* **2010**, *65*, 2305-2318. [doi:10.1093/jac/dkq326](https://doi.org/10.1093/jac/dkq326)
5. 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. [doi:10.1016/j.drug.2011.01.002](https://doi.org/10.1016/j.drug.2011.01.002)
6. 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. [doi:10.1016/j.biochi.2011.06.014](https://doi.org/10.1016/j.biochi.2011.06.014)
7. 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. *Antivir. Ther.* **2011**, *10*, 1035-1045. [doi:10.3851/IMP1862](https://doi.org/10.3851/IMP1862)
8. Maccioni, E.; Alcaro, S.; Cirilli, R.; Vigo, S.; Cardia, M.C.; Sanna, M.L.; Maleddu, R.; Yanez, M.; Costa, G.; Matyus, P.; Distinto, S. 3-Acetyl-2,5-

diaryl-2,3-dihydro-1,3,4-oxadiazoles: a new scaffold for selective inhibition of monoamine oxidase B. *J. Med. Chem.* **2011**, *54*, 6394-6398. [doi:10.1021/jm2002876](https://doi.org/10.1021/jm2002876)

9. 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**, *12*, 2203-2213. [doi:10.1002/cmdc.201100362](https://doi.org/10.1002/cmdc.201100362)
10. Alcaro, S.; Artese, A.; Costa, G.; Distinto, S.; Moraca, F.; Ortuso, F.; Parrotta, L. The polymorphism of DNA G-quadruplex investigated by docking experiments with telomestatin enantiomers. *Curr. Pharm. Des.* **2012**, *18*, 1873-1879. [doi:10.2174/138161212799958495](https://doi.org/10.2174/138161212799958495)
11. 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, M.F. New Structure-Activity Relationships of A- and D-Ring Modified Steroidal Aromatase Inhibitors. Synthesis, Biochemical Evaluation and Docking Studies. *J. Med. Chem.* **2012**, *55*, 3992-4002. [doi:10.1021/jm300262w](https://doi.org/10.1021/jm300262w)
12. 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, CF.; Ceccherini-Silberstein, F. HCV Genotypes are Differently Prone to the Development of Resistance to Linear and Macrocyclic Protease Inhibitors. *PLoS ONE* **2012**, *7*, [doi:10.1371/journal.pone.0039652](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0039652)
13. Cross, S.; Ortuso, F.; Baroni, M.; Costa, G.; Distinto, S.; Moraca, F.; Alcaro, S.; Cruciani, G. GRID-based 3D pharmacophores II: PharmBench, a benchmark dataset for evaluating pharmacophore elucidation methods. *J. Chem. Inf. Model.* **2012**, *52*, 2599-2608. [doi:10.1021/ci300154n](https://doi.org/10.1021/ci300154n)
14. Zhang, J.; Perno, CF.; 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. [doi:10.1093/bioinformatics/btt002](https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btt002)
15. 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. [doi:10.1021/jm3013486](https://doi.org/10.1021/jm3013486)

16. Artese, A.; Cross, S.; Costa, G.; Distinto, S.; Parrotta, L.; Alcaro, S.; Ortuso, F.; Cruciani, G. Molecular interaction fields in drug discovery: recent advances and future perspectives. *WIREs Comput Mol Sci.* **2013**, *3*, 594–613. [doi:10.1002/wcms.1150](https://doi.org/10.1002/wcms.1150)
17. Alteri, C.; Artese, A.; Beheydt, G.; Santoro, M.M.; Costa, G.; Parrotta, L.; Bertoli, A.; Gori, C.; Orchi, N.; Girardi, E.; Antinori, A.; Alcaro, S.; d'Arminio Monforte, A.; Theys, K.; Vandamme, A.M.; Ceccherini-Silberstein, F.; Svicher, V.; Perno, C.F. Structural modifications induced by specific HIV-1 protease-compensatory mutations have an impact on the virological response to a first-line lopinavir/ritonavir-containing regimen. *J. Antimicrob. Chemother.*, **2013**, *68*, 2205-2209. [doi:10.1093/jac/dkt173](https://doi.org/10.1093/jac/dkt173)
18. Fourati, S.; Visseaux, B.; Armenia, D.; Morand-Joubert, L.; Artese, A.; Charpentier, C.; Van Den Eede, P.; Costa, G.; Alcaro, S.; Wirlden, M.; Perno, C.F.; Ceccherini Silberstein, F.; Descamps, D.; Calvez, V.; Marcelin A.G. Identification of a rare mutation at reverse transcriptase Lys65 (K65E) in HIV-1-infected patients failing on nucleos(t)ide reverse transcriptase inhibitors. *J. Antimicrob. Chemother.*, **2013**, *68*, 2109-2204. [doi:10.1093/jac/dkt200](https://doi.org/10.1093/jac/dkt200)
19. Artese, A.; Parrotta, L.; Alcaro, S.; Ortuso, F.; Costa, G.; Sissi, C. Molecular Recognition of Human Telomeric DNA by Phenanthroline-Based G-Quadruplex Ligands. *OJMC*, **2013**, *3*, 41-49. [doi:10.4236/ojmc.2013.32006](https://doi.org/10.4236/ojmc.2013.32006)
20. Artese, A.; Costa, G.; Distinto, S.; Moraca, F.; Ortuso, F.; Parrotta, L.; Alcaro, S. Toward the design of new DNA G-quadruplex ligands through rational analysis of polymorphism and binding data. *Eur. J. Med. Chem.* **2013**, *68*, 139-149. [doi:10.1016/j.ejmech.2013.07.022](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2013.07.022)
21. Artese, A.; Costa, G.; Ortuso, F.; Parrotta, L.; Alcaro, S. Identification of New Natural DNA G-Quadruplex Binders Selected by a Structure-Based Virtual Screening Approach. *Molecules*, **2013**, *18*, 12051-12070. [doi:10.3390/molecules181012051](https://doi.org/10.3390/molecules181012051)
22. Sattin, G.; Artese, A.; Nadai, M.; Costa, G.; Parrotta, L.; Alcaro, S.; Palumbo, M.; Richter, SN. Conformation and stability of intramolecular telomeric g-quadruplexes: sequence effects in the loops. *PLoS ONE* **2013**, *12*, [doi:10.1371/journal.pone.0084113](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0084113)
23. Percivalle, C.; Sissi, C.; Greco, ML.; Musetti, C.; Mariani, A.; Artese, A.; Costa, G.; Perrone, ML.; Alcaro, S.; Freccero, M. Aryl Ethynyl Anthraquinones: a Useful Platform for Targeting Telomeric G-quadruplex Structures. *Org. Biomol. Chem.*, **2014**, *12*, 3744-3753. [doi:10.1039/C4OB00220B](https://doi.org/10.1039/C4OB00220B)
24. Di Maio, V.C.; Cento, V.; Mirabelli, C.; Artese, A.; Costa, G.; Alcaro, S.; Perno, C.F.; Ceccherini-Silberstein, F. The HCV genetic variability and the presence of NS5B resistance-associated mutations as natural polymorphisms in

- selected genotypes could affect the response to NS5B-inhibitors. *Antimicrob. Agents. Chemother.* **2014**, *58*, 2781-2797 [doi:10.1128/AAC.02386-13](https://doi.org/10.1128/AAC.02386-13)
25. Malet, I.; Arriaga, LG.; Artese, A.; Costa, G.; Parrotta, L.; Alcaro, S.; Delelis, O.; Tmeizeh, A.; Katlama, C.; Valantin, MA.; Ceccherini-Silberstein, F.; Calvez, V.; Marcelin, AG. New raltegravir resistance pathways induce broad cross-resistance to all currently used integrase inhibitors. *J. Antimicrob. Chemother.*, **2014**, Accepted Manuscript, [doi:10.1093/jac/dku095](https://doi.org/10.1093/jac/dku095)
26. De Monte, C.; Carradori, S.; Chimenti, P.; Secci, D.; Mannina, L.; Alcaro, F.; Petzer, A.; N'Da, CI; Gidaro, MC; Costa, G.; Alcaro, S.; Petzer JP. New insights into the biological properties of *Crocus sativus* L.: chemical modifications, human monoamine oxidases inhibition and molecular modeling studies. *Eur. J. Med. Chem.* **2014**, *82*, 164-171. [doi:10.1016/j.ejmech.2014.05.048](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2014.05.048)
27. Ortuso, F.; Amato, R.; Artese, A.; D'antona, L.; Costa, G.; Talarico, C.; Gigliotti, F.; Bianco, C.; Trapasso, F.; Schenone, S.; Musumeci, F.; Botta, L.; Perrotti, N; Alcaro, S. In silico identification and biological evaluation of novel se-lective Serum/Glucocorticoid-inducible kinase 1 inhibitors based on the pyrazolo-pyrimidine scaffold. *J. Chem. Inf. Model.* **2014**, *54*, 1828-1832. [doi:10.1021/ci500235f](https://doi.org/10.1021/ci500235f)
28. Parrotta, L.; Ortuso, F.; Moraca, F.; Rocca, R.; Costa, G.; Alcaro, S.; Artese, A. Targeting unimolecular G-quadruplex nucleic acids: a new paradigm for the drug discovery? *Expert Opin Drug Discov* **2014**, *9*, 1-21. [doi:10.1517/17460441.2014.941353](https://doi.org/10.1517/17460441.2014.941353)
29. Rocca, R.; Moraca, F.; Costa, G.; Alcaro, S.; Distinto, S.; Maccioni, E.; Ortuso, F.; Artese, A.; Parrotta, L. Structure-Based Virtual Screening of Novel Natural Alkaloid Derivatives as Potential Binders of h-telo and c-myc DNA G-Quadruplex Conformations. *Molecules* **2015**, *20*, 206-223. [doi:10.3390/molecules20010206](https://doi.org/10.3390/molecules20010206)
30. De Monte, C.; Bizzarri, B.; Gidaro, M.C.; Carradori, S.; Mollica, A.; Luisi, G.; Granese, A.; Alcaro, S.; Costa, G.; Basilico, N.; Parapini, S.; Scaltrito, M.M.; Masia, C.; Sisto, F. Bioactive compounds of *Crocus sativus* L. and their semi-synthetic derivatives as promising anti-*Helicobacter pylori*, anti-malarial and anti-leishmanial agents. *J Enzyme Inhib Med Chem.* **2015**, *13*, 1-7. [doi:10.3109/14756366.2014.1001755](https://doi.org/10.3109/14756366.2014.1001755)
31. Surdo, M.; Alteri, C.; Puertas, M.C.; Saccomandi, P.; Parrotta, L.; Swenson, L.; Chapman, D.; Costa, G.; Artese, A.; Balestra, E.; Aquaro, S.; Alcaro, S.; Lewis, M.; Clotet, B.; Harrigan, R.; Valdez, H.; Svicher, V.; Perno, C.F.; Martinez-Picado, J.; F. Ceccherini-Silberstein. Effect of maraviroc on non-R5 tropic HIV-1: refined analysis of subjects from the phase IIb study A4001029 *Clinical Microbiology and Infection* **2015**, *21*, 103.e1–103.e6. [doi:10.1016/j.cmi.2014.08.002](https://doi.org/10.1016/j.cmi.2014.08.002)

32. Gidaro, M.C.; Alcaro, F.; Carradori, S.; Costa, G.; Vullo, D.; Supuran, C.T.; Alcaro, S. Eriocitrin and Apigenin as New Carbonic Anhydrase VA Inhibitors from a Virtual Screening of Calabrian Natural Products. *Planta Medica* **2015**, *81*, 533-540. [doi:10.1055/s-0034-1396139](https://doi.org/10.1055/s-0034-1396139)
33. D'Ascenzio, M.; Chimenti, P.; Gidaro, M.C.; De Monte, C.; De Vita, D.; Granese, A.; Scipione, L.; Di Santo, R.; Costa, G.; Alcaro, S.; Yáñez, M.; Carradori, S. (Thiazol-2-yl)hydrazone derivatives from acetylpyridines as dual inhibitors of MAO and AChE: synthesis, biological evaluation and molecular modeling studies. *J Enzyme Inhib Med Chem*. **2015**, *25*, 1-12. [doi:10.3109/14756366.2014.987138](https://doi.org/10.3109/14756366.2014.987138)
34. D'Antona, L.; Amato, R.; Talarico, C.; Ortuso, F.; Menniti, M.; Dattilo, V.; Iuliano, R.; Gigliotti, F.; Artese, A.; Costa, G.; Schenone, S.; Musumeci, F.; Abbruzzese, C.; Botta, L.; Trapasso, F.; Alcaro, S.; Paggi, M.G.; Perrotti, N. SII13, a Specific Inhibitor of the Sgk1 Kinase Activity that Counteracts Cancer Cell Proliferation. *Cell Physiol Biochem* **2015**, *35*, 2006-2018. [doi:10.1159/000374008](https://doi.org/10.1159/000374008)
35. Alteri, C.; Surdo, M.; Bellocchi, MC.; Saccomandi, P.; Continenza, F.; Armenia, D.; Parrotta, L.; Carioti, L.; Costa, G.; Fourati, S.; Di Santo, F.; Scutari, R.; Barbaliscia, S.; Fedele, V.; Carta, S.; Balestra, E.; Alcaro, S.; Marcellin, AG.; Calvez, V.; Ceccherini-Silberstein, F.; Artese, A.; Perno, CF.; Svicher, V. Incomplete Apobec3G/F neutralization by HIV-1 Vif mutations facilitates the genetic evolution from CCR5 to CXCR4 usage. *Antimicrob Agents Chemother* **2015**, *59*, 4870-4881. [doi:10.1128/AAC.00137-15](https://doi.org/10.1128/AAC.00137-15)
36. Gidaro, MC.; Astorino, C.; Petzer, A.; Carradori, S.; Alcaro, F.; Costa, G.; Artese, A.; Rafele, G.; Russo, FM.; Petzer, JP.; Alcaro, S. Kaempferol as selective human MAO-A inhibitor: analytical detection in Calabrian red wines, biological and molecular modelling studies. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* **2016**, *64*, 1394-1400. [doi:10.1021/acs.jafc.5b06043](https://doi.org/10.1021/acs.jafc.5b06043)
37. Rocca, R.; Costa, G.; Artese, A.; Parrotta, L.; Ortuso, F.; Maccioni, E.; Pinato, O.; Greco, ML.; Sissi, C.; Alcaro, S.; Distinto, S.; Moraca, F. Hit Identification of a Novel Dual Binder for h-telo/c-myc G-quadruplex by a Combination of Pharmacophore Structure Based Virtual Screening and Docking Refinement. *ChemMedChem* **2016**, *11*, 1721-1733. [doi:10.1002/cmde.201600053](https://doi.org/10.1002/cmde.201600053)
38. Aiello, F.; Badolato, M.; Pessina, F.; Sticozzi, C.; Maestrini, V.; Aldinucci, C.; Luongo, L.; Guida, F.; Ligresti, A.; Artese, A.; Allarà, M.; Costa, G.; Frosini, M.; Schiano Moriello, A.; De Petrocellis, L.; Valacchi, G.; Alcaro, S.; Maione, S.; Di Marzo, V.; Corelli, F.; Brizzi, A. Design and synthesis of new Transient Receptor Potential Vanilloid Type-1 (TRPV1) channel modulators: identification, molecular modelling analysis and pharmacological characterization of the N-(4-hydroxy-3-methoxybenzyl)-4-(thiophen-2-yl)butanamide, a small molecule endowed with agonist TRPV1 activity and

protective effects against oxidative stress. *ACS Chem Neurosci*, **2016**, *7*, 737-748. [doi:10.1021/acscemneuro.5b00333](https://doi.org/10.1021/acscemneuro.5b00333)

39. Varela, C.L.; Amaral, C.; Correia-da-Silva, G.; Costa, S.C.; Carvalho, R.A.; Costa, G.; Alcaro, S.; Teixeira, N.A.; Tavares-da-Silva, E.J.; Roleira, F.M. Exploring New Chemical Functionalities to Improve Aromatase Inhibition of Steroids. *Bioorg. Med. Chem.* **2016**, *24*, 2823-2831. [doi:10.1016/j.bmc.2016.04.056](https://doi.org/10.1016/j.bmc.2016.04.056)
40. Costa, G.; Gidaro, MC.; Vullo, D.; Supuran, C.; Alcaro, S. The Essential Oils as Resources of Anti-Obesity Potential Drugs investigated by in silico techniques. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* **2016**, *64*, 5295-5300. [doi:10.1021/acs.jafc.6b02004](https://doi.org/10.1021/acs.jafc.6b02004)
41. Costa, G.; Rocca, R.; Moraca, F.; Romeo, I.; Talarico, C.; Ortuso, F.; Alcaro, S.; Artese, A. A comparative docking strategy to identify polyphenolic derivatives as promising antineoplastic binders of G-quadruplex DNA c-myc and bcl-2 sequences. *Molecular Informatics*, **2016**, *35*, 391-402. [doi:10.1002/minf.201501040](https://doi.org/10.1002/minf.201501040)
42. Alteri, C.; Surdo, M.; Di Maio, V.C.; Di Santo, F.; Costa, G.; Parrotta, L.; Romeo, I.; Gori, C.; Santoro, M.M.; Fedele, V.; Carta, S.; Continenza, F.; Pinnetti, C.; Bellagamba, R.; Liuzzi, G.; Orchi, N.; Latini, A.; Bertoli, A.; Girardi, E.; Alcaro, S.; Giuliani, M.; Petrosillo, N.; Andreoni, M.; Antinori, A.; Monforte, A.D.; Ceccherini-Silberstein, F.; Artese, A.; Perno, C.F.; Svicher, V. The HIV-1 reverse transcriptase polymorphism A98S improves the response to tenofovir disoproxil fumarate+emtricitabine-containing HAART both in vivo and in vitro. *Journal of Global Antimicrobial Resistance*, **2016**, *7*, 1-7. [doi:10.1016/j.jgar.2016.06.005](https://doi.org/10.1016/j.jgar.2016.06.005)
43. Doria, F.; Nadai, M.; Costa, G.; Sattin, G.; Gallati, C.; Bergamaschi, G.; Moraca, F.; Alcaro, S.; Freccero, M.; Richter, S. Extended Naphthalene Diimides with Donor/Acceptor Hydrogen-Bonding Properties Targeting G-Quadruplex Nucleic Acids. *European Journal of Organic Chemistry*, **2016**, *2016*, 4824-4833. [doi:10.1002/ejoc.201600757](https://doi.org/10.1002/ejoc.201600757)
44. Carradori, S.; Gidaro, MC.; Petzer, A.; Costa, G.; Guglielmi, P.; Chimenti, P.; Alcaro, S.; Petzer, JB. Inhibition of Human Monoamine Oxidase: Biological and Molecular Modeling Studies on Selected Natural Flavonoids. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, **2016**, *64*, 9004-9011. [doi:10.1021/acs.jafc.6b03529](https://doi.org/10.1021/acs.jafc.6b03529)
45. Rocca, R.; Moraca, F.; Costa, G.; Nadai, M.; Scalabrin, M.; Talarico, C.; Distinto, S.; Maccioni, E.; Ortuso, F.; Artese, A.; Alcaro, S.; Richter, SN. Identification of G-quadruplex DNA/RNA binders: Structure-based virtual screening and biophysical characterization. *Biochimica et Biophysica Acta*, **2017**, ASAP. [doi:10.1016/j.bbagen.2016.12.023](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2016.12.023)

46. Milelli, A.; Marchetti, C.; Greco, ML.; Moraca, F.; Costa, G.; Turrini, E.; Catanzaro, E.; Betari, N.; Calcabrini, C.; Sissi, C.; Alcaro, S.; Fimognari, C.; Tumiatti, V.; Minarini, A. Naphthalene diimide-polyamine hybrids as antiproliferative agents: Focus on the architecture of the polyamine chains. *European Journal of Medicinal Chemistry*, **2017**, *128*, 107-122. [doi:10.1016/j.ejmech.2017.01.025](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2017.01.025)
47. Rocca, R.; Talarico, C.; Moraca, F.; Costa, G.; Romeo, I.; Ortuso, F.; Alcaro, S.; Artese, A. Molecular recognition of a carboxy pyridostatin towards G-quadruplex structures: why does it prefer RNA? *Chemical biology and drug design*, **2017**, ASAP, [doi:10.1111/cbdd.13015](https://doi.org/10.1111/cbdd.13015)

Comunicazioni orali

1. Computational study for the identification and structural characterization of novel genetic elements in the HIV-1 V3 loop regulating co-receptor usage, *VI Meeting NPCF*, Riccione (RN), 15-17 Aprile **2012**
2. The polymorphism of DNA G-quadruplex investigated by docking experiments with telomestatin enantiomers. *XXXIV Convegno Divisione di Chimica Organica*, Pavia, 10-14 Settembre **2012**.
3. Identification and Characterization of New DNA G- Quadruplex Binders Selected by a Combination of Ligand and Structure-Based Virtual Screening Approaches. *II Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale*, Padova, 20-22 Febbraio **2013**.
4. Toward the design of new DNA G-quadruplex ligands through rational analysis of polymorphism and binding data. *VII Meeting NPCF*, Savigliano (CN), 29-31 Maggio **2013**.
5. Virtual Screening of Nutraceutical Products. *NanoInnovation 2016*, Rome, 20-23 September **2016**.