

## CURRICULUM VITAE

### Formazione Scientifica ed attività di docenza

Nato a Bari il 2/11/1976, Andrea Carotti si è laureato con il massimo voti e lode in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche presso l'Università di Bari nel febbraio 2001, discutendo la tesi sperimentale dal titolo "Ligandi del recettore benzodiazepinico centrale: modelli 3-D QSAR e predizione della loro attività intrinseca", preparata sotto la supervisione del prof. Cosimo Altomare.

Vincitore di una borsa di studio per il corso di Dottorato di Ricerca in "Chimica del Farmaco" presso il Dipartimento Farmaco-chimico dello stesso Ateneo, ha condotto studi di modellizzazione di inibitori enzimatici (monoamino ossidasi) e modulatori di fattori della coagulazione del sangue. In particolare, nel triennio di preparazione della tesi dottorale, la sua ricerca si è rivolta allo studio computazionale di dinamica molecolare comparativa di trombina (e suoi mutanti patogeni) e fattore Xa, con l'obiettivo di progettarne inibitori potenti e selettivi. Nell'aprile 2004 ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca discutendo la tesi "Innovative Computer-Assisted Approaches in Lead Finding and Optimization of Neurological and Antithrombotic Drugs", preparata sotto la supervisione del Prof. Cosimo Altomare.

Nell'aprile 2004 ha ottenuto un assegno di ricerca biennale, rinnovato per ulteriori due anni, presso il Dipartimento Farmaco-chimico (Università degli Studi di Bari) sotto la supervisione del Prof. Cosimo Altomare per un programma di ricerca dal titolo: "Nuove strategie computazionali per la progettazione di farmaci antitrombotici agenti come inibitori selettivi di fattori della coagulazione".

Nell'anno accademico 2006-2007 ha svolto attività seminariale di supporto e di tutoraggio al laboratorio del corso ufficiale di "Introduzione alla bioinformatica genomica e laboratorio di bioinformatica" (3+2L CFU) del Corso di Laurea in Biotecnologie (indirizzo farmaceutico) presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN. dell'Università degli Studi di Perugia.

Nell'anno accademico 2007-2008 è risultato vincitore del bando di concorso indetto per l'assegnazione dell'insegnamento dal titolo "Introduzione alla Bioinformatica Genomica e Laboratorio di Bioinformatica" (3+2L CFU) del Corso di Laurea in Biotecnologie presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN dell'Università degli Studi di Perugia.

Nell'anno 2007 è risultato vincitore di un concorso di ricercatore universitario per il settore CHIM-08 presso la Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Perugia ed ha assunto servizio il 28-04-2008 afferendo al Dipartimento di Chimica e Tecnologia del Farmaco – Sezione di Chimica Farmaceutica I. In data 28-4-2011 il Dott. Andrea Carotti è stato confermato in ruolo.

Nell'anno accademico 2008-2009 è stato titolare dell'insegnamento dal titolo "Introduzione alla

Bioinformatica Genomica e Laboratorio di Bioinformatica” (3+2L CFU) del Corso di Laurea in Biotecnologie presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN dell’Università degli Studi di Perugia.

Negli anni accademici 2010-2011 e 2011-2012 è stato titolare dell’insegnamento dal titolo “Applicazioni computazionali per lo studio di biomacromolecole” (3+2L CFU) del Corso di Laurea in Biotecnologie presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN dell’Università degli Studi di Perugia.

Nell’anno accademico 2011-2012 è stato titolare dell’insegnamento dal titolo “Analisi dei Medicinali II” (3+3L CFU) del Corso di Laurea in Farmacia presso la Facoltà di Farmacia dell’Università degli Studi di Perugia.

Dall’anno accademico 2012-2013 al 2017-2018 è titolare dell’insegnamento dal titolo “Analisi dei Medicinali I” (3+3L CFU) del Corso di Laurea in Farmacia presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell’Università degli Studi di Perugia.

Nel 2017 ha tenuto un Corso di “Introduzione alla Bioinformatica genomica: teoria ed esempi pratici” (2 CFU, 12 h), 24-27 luglio 2017, lezioni per dottorato XXXII ciclo in “SCIENZE FARMACEUTICHE” (Dottorato Internazionale) Farmacia presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell’Università degli Studi di Perugia.

Il Dott. Andrea Carotti ha partecipato in qualità di relatore a 9 congressi nazionali ed internazionali ed è co-autore di 56 pubblicazioni scientifiche con sistema ‘peer reviewing’, di cui 54 indicizzate su WoS (in 10 è primo autore o autore di riferimento; H-Index: 16; N. Citazioni: 601; N. citazioni medie per pubblicazione: 13,36; IF totale: 177,13; Fonte: WoS).

I lavori scientifici hanno visto il contributo di qualificati gruppi di ricerca di importanti istituzioni didattico-scientifiche nazionali ed internazionali quali l’Università Cattolica del Sacro Cuore di Roma, Università degli Studi di Siena, Università degli Studi di Milano, Università degli Studi di Messina, Università degli Studi di Firenze, Università degli Studi di Bologna, Università degli Studi di Cagliari, Università de Lausanne, University of Prague, University of Vienna, University of Tuebingen, University of Gazi-Ankara, Universidad de Santiago de Compostela, People friendship University of Russia e la University of Maryland.

Il Dott. Andrea Carotti è stato co-relatore di 3 Tesi Sperimentali per i CdLM in Farmacia e CTF e nel 2010 ha partecipato come collaboratore al progetto europeo FP6 PRIORITY LSH-2005-2.2.0-8: “Small-ligand libraries: improved tools for exploration and prospective antitumour therapy. DePPICT Project (Designing Therapeutic Protein- Protein Inhibitors for Brain Cancer Treatments)” (Contract number: LSHC-CT-2007-037834, Importo finanziato € 3.640.293). Nel 2008 ha partecipato come collaboratore al Progetto di Ricerca PRIN-2008 (Protocollo20085HR5JK\_001) dal titolo "Disegno, sintesi e valutazione biologica di nuovi modulatori della via delle chinurenine verso lo sviluppo di nuove terapie neuroprotettive per il morbo di Huntington." (Principal

investigator: Prof. Gabriele Costantino). Dal 2013 ad oggi partecipa come collaboratore al Progetto ERC ERC-2013-AdG 338954-DIDO "Innovative drugs targeting IDO molecular dynamics in autoimmunity and neoplasia" (importo finanziato € 2.442.078. Responsabile dell'unità: Prof Antonio Macchiarulo).

Il Dott. Andrea Carotti nel 2013 ha contribuito, come responsabile scientifico, alla fondazione e sviluppo dell'azienda farmaceutica, Evias Pharmaceutical R&D Ltd. Co., Bahçelievler Mah. 320. Sk. 3/B, Gazi Üniversitesi Gölbaşı Yerleşkesi Teknoplaza Binası G1 101, Gölbaşı - Ankara, TURKEY. L'azienda ha ricevuto finanziamenti dal governo turco con i bandi "The Scientific and Technological Research Council of Turkey (TUBİTAK)" e "Small and Medium Business Development and Support Administration of Turkey (KOSGEB)". Inoltre, l'azienda fa parte del progetto "European Cooperation in Science and Technology (COST)". Attualmente collabora con la suddetta azienda come scientific advisor.

### **Interessi e capacità professionali**

Nel corso delle sue esperienze scientifiche e professionali, il Dr. Andrea Carotti ha maturato conoscenze approfondite dei più recenti approcci computazionali di *Molecular Modelling* e di metodi chemiometrici e bioinformatici di analisi multivariata dei dati. Grazie alle sue buone capacità di gestione hardware ed alle sue competenze nell'uso e manutenzione di sistemi operativi (Linux e Unix), ha progettato, installato e testato un cluster Linux di 12 nodi (16 CPUs) con distribuzione Fedora Core 2 e Kernel openMosix. Tuttora è amministratore di sistema ed utilizzatore, insieme al gruppo di ricerca di cui fa parte, di un cluster Linux di ultima generazione composto da 20 nodi (120 cores) e distribuzione Rocks 5.2. Ha acquisito spiccate abilità nella gestione e nell'uso di softwares di Modelling molecolare (Sybyl, Catalyst, Volsurf, Grid, Gromacs, Amber, Gaussian, Pymol, Schrodinger Suite), di Bioinformatica (Fasta, ClustalW, Stride, DSSP, SwissPDB-Viewer, PSI-Blasta ecc.) e di Chemiometria (Parvus, Golpe, Unscrambler, Simca-P 10, Statistica 8).

Dal 2008 il Dr. Andrea Carotti è membro della Società Chimica Italiana.

### **Tematiche di Ricerca**

Nel suo percorso formativo e scientifico, il dott. Carotti ha raggiunto buoni livelli di conoscenza della lingua inglese. I suoi studi hanno riguardato diversi recettori nucleari (FXR, PXR, TGR5), la via delle chinurenine, il recettore nucleare dei nematodi DAF-12, proteine coinvolte nella tumorigenesi (MDM2, MDMX, p53), la trombina ed il fattore Xa.

L'attività scientifica per l'anno 2017-2018 comprenderà: (a) utilizzo di sistemi di calcolo *ab initio* per la simulazione di spettri di dicroismo circolare elettronico (ECD) e vibrazionale (VCD); (b) studi di dinamica molecolare per simulare l'interazione di analita-selettore chirale in colonne cromatografiche attraverso tecnologie informatiche ad alte prestazioni (GPU); (c) approfondimento di nuovi targets molecolari coinvolti nel controllo dei livelli di NAD nelle cellule; (d) sviluppo di molecole bioattive sul target IDO.

### **Organizzazione di Congressi Nazionali ed Internazionali**

Membro del comitato organizzatore del congresso internazionale "Recent Developments in Pharmaceutical Analysis (RDPA) 2015", 28 Giugno - 1 Luglio, 2015, Perugia, Italia.

Membro del comitato organizzatore del congresso "GPSS- 2015, Gazi Pharma Symposium", 12-15 Novembre, 2015, Antalya, Turchia.

Organizzatore (co-chair) della International Summer School per PhDs "International Bioinformatics Summer School - Resources and Technique in Computational Drug Discovery", 23-26 maggio 2016, Tangier, Marocco.

Membro del comitato organizzatore del congresso internazionale "XXIV National Meeting in Medicinal Chemistry (NMMC) – 10th Young Medicinal Chemists' Symposium (Nuove Prospettive in Chimica Farmaceutica, NPCF)", 11-14 Settembre, 2016, Perugia, Italia.

### **Premi**

Vincitore di 50000 ore di calcolo nel ISCRA C calls del CINECA Italian Institute. Titolo del progetto "BASMIC: Bile AcidS MICelles". La valutazione è stata fatta sulla base del progetto presentato e del CV del candidato (12/2011).

### **Presentazioni Orali**

1. Titolo: "Targeting the FXR nuclear receptor through a virtual screening approach". XXX Convegno Interregionale Toscana-Umbria-Marche-Abruzzo (TUMA), Perugia, Italy, 2011, 30 June -1 July.
2. Titolo: "Study of the micelle formation process of bile acids through molecular dynamics simulations" Computationally Driven Drug Discovery Meeting (CDDD), 21-23 November, 2011, Aquila, Italy.
3. Titolo: "Effects of Molecular Dynamics and Replica Exchange Molecular Dynamics in Sampling the Conformational Space of PARP-1" Computationally Driven Drug Discovery Meeting (CDDD), 4-6 February, 2013, Genova, Italy.

4. Titolo: “1 $\mu$ s Molecular Dynamics Simulations to study the poisoning effect of the PARP-1 full length enzyme” Computationally Driven Drug Discovery Meeting (CDDD), 4-6 March, 2014, Verona, Italy.
5. Titolo: “Investigating the Allosteric Reverse Signaling of PARP Inhibitors with Microsecond Molecular Dynamic Simulations and Fluorescence Anisotropy”. Invited Speaker at Summer School in Biotechnology - Molecular Aspects of Chemotherapy, 25-26 September, 2014, Gdansk, Poland.
6. Titolo: “PHARMACoinformatics in Drug R&D Process”. GPSS - 1st International Gazi Pharma Symposium Series, 12-15 November, 2015, Antalya, Turkey.
7. Titolo: “Successful rate gain by combination of multiple techniques”. Invited Speaker at International Bioinformatics Summer School - Resources and Technique in Computational Drug Discovery, 23-26 May, 2016, Tangier, Morocco.
8. Titolo: “Computational Modeling Overview and Evolution”. Invited Speaker at International Bioinformatics Summer School - Resources and Technique in Computational Drug Discovery, 23-26 May, 2016, Tangier, Morocco.
9. Titolo: “In Silico Approaches Supporting Pharmaceutical Analysis Enigmas”. XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, 10-14 September, 2017, Paestum (SA), Italy.

## Publicazioni

Martina Ferri, Paride Liscio, Andrea Carotti, Stefania Ascutti, Rocco Sardella, Antonio Macchiarulo, Emidio Camaioni: *Targeting Wnt-driven cancers: Discovery of novel tankyrase inhibitors*. European Journal of Medicinal Chemistry 10/2017, DOI:10.1016/j.ejmech.2017.09.030.

Francesco Antonio Greco, Alice Coletti, Chiara Custodi, Daniela Dolciemi, Alessandro Di Michele, Andrea Carotti, Maura Marinozzi, Nina Schlinck, Antonio Macchiarulo: *Binding properties of different categories of IDO1 inhibitors: A microscale thermophoresis study*. Future medicinal chemistry 08/2017; 9(12)., DOI:10.4155/fmc-2017-0022.

Rocco Sardella, Federica Ianni, Alessandro Di Michele, Angela Di Capua, **Andrea Carotti\***, Maurizio Anzini, Benedetto Natalini: *Enantioresolution and stereochemical characterization of two chiral sulfoxides endowed with COX-2 inhibitory activity*. Chirality 06/2017, DOI:10.1002/chir.22724

Stefano Giovagnoli, Donatella Pietrella, Lanfranco Barberini, Claudio Santi, Andrea Carotti, Alessandro di Michele, Maurizio Ricci: *Reshaping antibiotics through hydrophobic drug-bile*

*acid ionic complexation enhances activity against Staphylococcus aureus biofilms.*  
International Journal of Pharmaceutics 06/2017, DOI:10.1016/j.ijpharm.2017.06.008

Giuseppe Felice Mangiatordi, Domenico Alberga, Leonardo Pisani, Domenico Gadaleta, Daniela Trisciuzzi, Roberta Farina, Andrea Carotti, Gianluca Lattanzi, Marco Catto, Orazio Nicolotti: *A rational approach to elucidate human monoamine oxidase molecular selectivity.* European journal of pharmaceutical sciences: official journal of the European Federation for Pharmaceutical Sciences 02/2017; 101., DOI:10.1016/j.ejps.2017.02.008

**Andrea Carotti**, Federica Ianni, Emidio Camaioni, Lucia Pucciarini, Maura Marinozzi, Roccald Sardella, Benedetto Natalini: *N-Decyl-S-trityl-(R)-cysteine, a new chiral selector for "green" ligand-exchange chromatography applications.* Journal of pharmaceutical and biomedical analysis 02/2017, DOI:10.1016/j.jpba.2017.02.009

Roccald Sardella, Federica Ianni, Antonio Macchiarulo, Lucia Pucciarini, **Andrea Carotti\***, Benedetto Natalini: *Computational Studies For The Elucidation Of The Enantiomer Elution Order In Chiral Chromatography Systems.* Mini Reviews in Medicinal Chemistry 10/2016; 16(999), DOI:10.2174/1389557516666161018143629.

Roberto Pellicciari, Daniela Passeri, Francesca De Franco, Serena Mostarda, Paolo Filipponi, Carolina Colliva, Raffaella Maria Gadaleta, Placido Franco, Andrea Carotti, Antonio Macchiarulo, Aldo Roda, Antonio Moschetta, Antimo Gioiello: *Discovery of 3 $\alpha$ ,7 $\alpha$ ,11 $\beta$ -Trihydroxy-6 $\alpha$ -ethyl-5 $\beta$ -cholan-24-oic Acid (TC-100), a Novel Bile Acid as Potent and Highly Selective FXR Agonist for Enterohepatic Disorders.* Journal of Medicinal Chemistry 09/2016; 59(19)., DOI:10.1021/acs.jmedchem.6b01126

Francesco Antonio Greco, Answald Bournique, Alice Coletti, Chiara Custodi, Daniela Dolciami, Andrea Carotti, Antonio Macchiarulo: *Docking Studies and Molecular Dynamic Simulations Reveal Different Features of IDO1 Structure.* Molecular Informatics 07/2016; 35(8-9)., DOI:10.1002/minf.201501038

Serkan Levent, Jana Gerstmeier, Abdurrahman Olgaç, Felix Nikels, Ulrike Garscha, Andrea Carotti, Antonio Macchiarulo, Oliver Werz, Erden Banoglu, Burcu Çalışkan: *Synthesis and biological evaluation of C(5)-substituted derivatives of leukotriene biosynthesis inhibitor BRP-7.* European Journal of Medicinal Chemistry 07/2016; 122., DOI:10.1016/j.ejmech.2016.07.004

**Andrea Carotti**, Federica Ianni, Stefano Sabatini, Alessandro Di Michele, Roccald Sardella, Glenn W. Kaatz, Wolfgang Lindner, Violetta Cecchetti, Benedetto Natalini: *The "racemic approach" in the evaluation of the enantiomeric NorA efflux pump inhibition activity of 2-phenylquinoline derivatives.* Journal of pharmaceutical and biomedical analysis 07/2016; 129.,

DOI:10.1016/j.jpba.2016.07.003

Nóra Grecsó, Michal Kohout, Andrea Carotti, Roccaldo Sardella, Benedetto Natalini, Ferenc Fülöp, Wolfgang Lindner, Antal Péter, István Ilisz: *Mechanistic considerations of enantioselective recognition on novel Cinchona alkaloid-based zwitterionic chiral stationary phases from the aspect of the separation of trans-paroxetine enantiomers as model compounds*. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis 05/2016; 124:164 - 173., DOI:10.1016/j.jpba.2016.02.043

Erden Banoglu, Erşan Çelikoğlu, Susanna Völker, Abdurrahman Olgaç, Jana Gerstmeier, Ulrike Garscha, Burcu Çalışkan, Ulrich S. Schubert, Andrea Carotti, Antonio Macchiarulo, Oliver Werz: *4,5-Diarylisoxazol-3-carboxylic acids: A new class of leukotriene biosynthesis inhibitors potentially targeting 5-lipoxygenase-activating protein (FLAP)*. European Journal of Medicinal Chemistry 02/2016; 113., DOI:10.1016/j.ejmech.2016.02.027

Francesco Antonio Greco, Alice Coletti, Emidio Camaioni, Andrea Carotti, Maura Marinozzi, Antimo Gioiello, Antonio Macchiarulo: *The Janus-faced nature of IDO1 in infectious diseases: Challenges and therapeutic opportunities*. Future medicinal chemistry 12/2015; 8(1), DOI:10.4155/fmc.15.165

Federica Ianni, Roccaldo Sardella, Andrea Carotti, Benedetto Natalini, Wolfgang Lindner, Michael Lämmerhofer: *Quinine-Based Zwitterionic Chiral Stationary Phase as a Complementary Tool for Peptide Analysis: Mobile Phase Effects on Enantio- and Stereoselectivity of Underivatized Oligopeptides*. Chirality 10/2015; 28(1), DOI:10.1002/chir.22541

Daniela Passeri, Emidio Camaioni, Paride Liscio, Paola Sabbatini, Martina Ferri, Andrea Carotti, Nicola Giacchè, Roberto Pellicciari, Antimo Gioiello, Antonio Macchiarulo: *Concepts and Molecular Aspects in the Polypharmacology of PARP-1 Inhibitors*. ChemMedChem 10/2015; 11(12), DOI:10.1002/cmdc.201500391

Federica Ianni, Andrea Carotti, Maura Marinozzi, Gloria Marcelli, Alessandro Di Michele, Roccaldo Sardella, Wolfgang Lindner, Benedetto Natalini: *Analytica Chimica Acta*. Analytica chimica acta 07/2015; 885:174-182., DOI:10.1016/j.aca.2015.06.001

Maura Marinozzi, Gloria Marcelli, Andrea Carotti: *N-Aryl-5-aminopyrazole: A Versatile Architecture in Medicinal Chemistry*. Mini Reviews in Medicinal Chemistry 03/2015; 15(4), DOI:10.2174/1389557515666150312154536

**Andrea Carotti**, Maura Marinozzi, Chiara Custodi, Bruno Cerra, Roberto Pellicciari, Antimo Gioiello, Antonio Macchiarulo: *Beyond Bile Acids: Targeting Farnesoid X Receptor (FXR) with Natural and Synthetic Ligands*. Current Topics in Medicinal Chemistry 11/2014; 14(19):2129-2142., DOI:10.2174/1568026614666141112094058

- Roccaldo Sardella, Andrea Carotti, Giuseppe Manfroni, Daniele Tedesco, Alma Martelli, Carlo Bertucci, Violetta Cecchetti, Benedetto Natalini: *Enantioresolution, stereochemical characterization and biological activity of a chiral large-conductance calcium-activated potassium channel opener*. *Journal of Chromatography A* 10/2014; 1363:162-168., DOI:10.1016/j.chroma.2014.06.020
- Maura Marinozzi, Gloria Marcelli, Andrea Carotti, Benedetto Natalini: *ChemInform Abstract: One-Pot, Telescoped Synthesis of N-Aryl-5-aminopyrazoles from Anilines in Environmentally Benign Conditions..* *ChemInform* 10/2014; 4(14):7019-7023., DOI:10.1039/C3RA47541G
- Paride Liscio, Andrea Carotti, Stefania Ascitti, Martina Ferri, Maira M Pires, Sara Valloscuro, Jacob Ziff, Neil R Clark, Antonio Macchiarulo, Stuart A Aaronson, Roberto Pellicciari, Emidio Camaioni: *Scaffold hopping approach on the route to selective tankyrase inhibitors*. *European Journal of Medicinal Chemistry* 10/2014; 87:611., DOI:10.1016/j.ejmech.2014.10.007
- Jean-Rémy Marchand, Andrea Carotti, Daniela Passeri, Paolo Filipponi, Paride Liscio, Emidio Camaioni, Roberto Pellicciari, Antimo Gioiello, Antonio Macchiarulo: *Investigating the Allosteric Reverse Signalling of PARP Inhibitors with Microsecond Molecular Dynamic Simulations and Fluorescence Anisotropy*. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Proteins & Proteomics* 10/2014; 1844(10)., DOI:10.1016/j.bbapap.2014.07.012
- Roccaldo Sardella, Antonella Lisanti, Andrea Carotti, Paolo Blasi, Wolfgang Lindner, Benedetto Natalini: *Ketoprofen enantioseparation with a Cinchona-alkaloid-based stationary phase: Enantiorecognition mechanism and release studies*. *Journal of Separation Science* 10/2014; 37(19):2696., DOI:10.1002/jssc.201400630
- Emiliano Rosatelli, Andrea Carotti, Mariangela Ceruso, Claudiu T Supuran, Antimo Gioiello: *Flow synthesis and biological activity of aryl sulfonamides as selective carbonic anhydrase IX and XII inhibitors*. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* 06/2014; 24(15)., DOI:10.1016/j.bmcl.2014.05.086
- Roccaldo Sardella, Andrea Carotti, Antimo Gioiello, Antonella Lisanti, Federica Ianni, Wolfgang Lindner, Benedetto Natalini: *Chromatographic separation of free dafachronic acid epimers with a novel triazole click quinidine-based chiral stationary phase*. *Journal of Chromatography A* 04/2014; 1339., DOI:10.1016/j.chroma.2014.02.080
- Paride Liscio, Andrea Carotti, Stefania Ascitti, Tobias Karlberg, Daniele Bellocchi, Laura Llacuna, Antonio Macchiarulo, Stuart A Aaronson, Herwig Schüler, Roberto Pellicciari, Emidio Camaioni: *Design, Synthesis, Crystallographic Studies, and Preliminary Biological Appraisal*



*of New Substituted Triazolo[4,3-b]pyridazin-8-amine Derivatives as Tankyrase Inhibitors.* Journal of Medicinal Chemistry 02/2014; 57(6)., DOI:10.1021/jm401356t

Paride Liscio, Emidio Camaioni, Andrea Carotti, Roberto Pellicciari, Antonio Macchiarulo: *From Polypharmacology to Target Specificity: The Case of PARP Inhibitors.* Current topics in medicinal chemistry 10/2013; 13(23)., DOI:10.2174/15680266113136660209

Modesto de Candia, Filomena Fiorella, Gianfranco Lopopolo, Andrea Carotti, Maria Rosaria Romano, Marcello Diego Lograno, Sophie Martel, Pierre Alain Carrupt, Benny D Belviso, Rocco Caliendo, Cosimo Altomare: *Synthesis and Biological Evaluation of Direct Thrombin Inhibitors Bearing 4-(Piperidin-1-yl)pyridine at the P1 Position with Potent Anticoagulant Activity.* Journal of Medicinal Chemistry 10/2013; 56(21)., DOI:10.1021/jm401169a

Albert A Antolin, Andrea Carotti, Roberto Nuti, Aydie Hakkaya, Emidio Camaioni, Jordi Mestres, Roberto Pellicciari, Antonio Macchiarulo: *Exploring the effect of PARP-1 flexibility in docking studies.* Journal of molecular graphics & modelling 09/2013; 45C:192-201., DOI:10.1016/j.jm gm.2013.08.006

Maura Marinozzi, Andrea Carotti, Roccaldo Sardella, Federica Buonerba, Federica Ianni, Benedetto Natalini, Daniela Passeri, Giovanni Rizzo, Roberto Pellicciari: *Asymmetric synthesis of the four diastereoisomers of a novel non-steroidal farnesoid X receptor (FXR) agonist: Role of the chirality on the biological activity.* Bioorganic & medicinal chemistry 04/2013; 21(13)., DOI:10.1016/j.bmc.2013.04.038

Antonio Macchiarulo, Andrea Carotti, Marco Cellanetti, Roccaldo Sardella, Antimo Gioiello: *Navigations of chemical space to further the understanding of polypharmacology in human nuclear receptors.* Medicinal Chemistry Communication 01/2013; 4(1):216-227., DOI:10.1039/c2md20157g

Roccaldo Sardella, Antonio Macchiarulo, Andrea Carotti, Federica Ianni, Maria Eugenia García Rubiño, Benedetto Natalini: *Chiral mobile phase in ligand-exchange chromatography of amino acids: Exploring the copper(II) salt anion effect with a computational approach.* Journal of Chromatography A 08/2012; 1269., DOI:10.1016/j.chroma.2012.08.018

Maura Marinozzi, Andrea Carotti, Emanuele Sansone, Antonio Macchiarulo, Emiliano Rosatelli, Roccaldo Sardella, Benedetto Natalini, Giovanni Rizzo, Luciano Adorini, Daniela Passeri, Francesca De Franco, Mark Pruzanski, Roberto Pellicciari: *Pyrazole[3,4-e][1,4]thiazepin-7-one derivatives as a novel class of Farnesoid X Receptor (FXR) agonists.* Bioorganic & medicinal chemistry 04/2012; 20(11):3429-45., DOI:10.1016/j.bmc.2012.04.021

Roberto Pellicciari, Emidio Camaioni, Adam M. Gilbert, Antonio Macchiarulo, Jack A. Bikker,

Falgun Shah, Joel Bard, Gabriele Costantino, Antimo Gioiello, Graeme M. Robertson, Paola Sabbatini, Francesco Venturoni, Paride Liscio, Andrea Carotti, Daniele Bellocchi, Andrea Cozzi, Andrew Wood, Cathleen Gonzales, Margaret M. Zaleska, John W. Ellingboe, Flavio Moroni: *Discovery and characterization of novel potent PARP-1 inhibitors endowed with neuroprotective properties: From TIQ-A to HYDAMTIQ*. Medicinal Chemistry Communication 06/2011; 2(6):559-565., DOI:10.1039/C1MD00021G

Antimo Gioiello, Antonio Macchiarulo, Andrea Carotti, Paolo Filipponi, Gabriele Costantino, Giovanni Rizzo, Luciano Adorini, Roberto Pellicciari: *Extending SAR of bile acids as FXR ligands: Discovery of 23-N-(carbocinnamyloxy)-3 $\alpha$ ,7 $\alpha$ -dihydroxy-6 $\alpha$ -ethyl-24-nor-5 $\beta$ -cholan-23-amine*. Bioorganic & medicinal chemistry 04/2011; 19(8):2650-8., DOI:10.1016/j.bmc.2011.03.004

Antonio Macchiarulo, Nicola Giacchè, Andrea Carotti, Fabiola Moretti, Roberto Pellicciari: *Expanding the horizon of chemotherapeutic targets: From MDM2 to MDMX (MDM4)*. Medicinal Chemistry Communication 02/2011; 2(6-2040-25031):455-465., DOI:10.1039/C0MD00238K

R. Pellicciari, A. Macchiarulo, A. Gioiello, C. Thomas, E. Rosatelli, P. Filipponi, A. Carotti, R. Nuti, D. Shapiro, G. Rizzo, A. Roda, L. Adorini, M. Prusaski, K. Schoonjans, J. Auwerx: *Deconstructing bile acid signaling pathways*. ACS National Meeting Book of Abstracts 01/2011; 241.

R. Pellicciari, A. Gioiello, E. Camaioni, A. Macchiarulo, A. Gilbert, J. Bikker, G. Costantino, G. M. Robertson, F. Venturoni, A. Carotti, D. Bellocchi, A. Cozzi, A. Wood, C. Gonzales, M. Zaleska, J. Ellingboe, M. Flavio: *HYDAMTIQ: A new, potent PARP-1 inhibitor with neuroprotective properties*. ACS National Meeting Book of Abstracts 01/2011; 241.

Cristina Dezi, Andrea Carotti, Matteo Magnani, Massimo Baroni, Alessandro Padova, Gabriele Cruciani, Antonio Macchiarulo, Roberto Pellicciari: *Molecular Interaction Fields and 3D-QSAR Studies of p53-MDM2 Inhibitors Suggest Additional Features of Ligand-Target Interaction*. Journal of Chemical Information and Modeling 08/2010; 50(8):1451-65., DOI:10.1021/ci100113p

**Andrea Carotti**, Antonio Macchiarulo, Nicola Giacchè, Roberto Pellicciari: *Targeting the conformational transitions of MDM2 and MDMX: Insights into key residues affecting p53 recognition*. Proteins Structure Function and Bioinformatics 11/2009; 77(3):524-35., DOI:10.1002/prot.22464

Daniele Bellocchi, Antonio Macchiarulo, Andrea Carotti, Roberto Pellicciari: *Quantum*

*mechanics/molecular mechanics (QM/MM) modeling of the irreversible transamination of L-kynurenine to kynurenic acid: The round dance of kynurenine aminotransferase II.* Biochimica et Biophysica Acta 09/2009; 1794(12):1802-12., DOI:10.1016/j.bbapap.2009.08.016

Modesto de Candia, Francesco Liantonio, Andrea Carotti, Raimondo De Cristofaro, Cosimo Altomare: *Fluorinated Benzyloxyphenyl Piperidine-4-carboxamides with Dual Function against Thrombosis: Inhibitors of Factor Xa and Platelet Aggregation.* Journal of Medicinal Chemistry 03/2009; 52(4):1018-28., DOI:10.1021/jm801141f

Roberto Pellicciari, Francesco Venturoni, Daniele Bellocchi, Andrea Carotti, Maura Marinozzi, Antonio Macchiarulo, Laura Amori, Robert Schwarcz: *Sequence Variants in Kynurenine Aminotransferase II (KAT II) Orthologs Determine Different Potencies of the Inhibitor S - ESBA.* ChemMedChem 08/2008; 3(8):1199-202., DOI:10.1002/cmdc.200800109

Orazio Nicolotti, Teresa Fabiola Miscioscia, Andrea Carotti, Francesco Leonetti, Angelo Carotti: *An Integrated Approach to Ligand- and Structure-Based Drug Design: Development and Application to a Series of Serine Protease Inhibitors.* Journal of Chemical Information and Modeling 07/2008; 48(6):1211-26., DOI:10.1021/ci800015s

**Andrea Carotti**, Marco Catto, Francesco Leonetti, Francesco Campagna, Ramón Soto-Otero, Estefanía Méndez-Alvarez, Ulrike Thull, Bernard Testa, Cosimo Altomare: *Synthesis and Monoamine Oxidase Inhibitory Activity of New Pyridazine-, Pyrimidine- and 1,2,4-Triazine-Containing Tricyclic Derivatives.* Journal of Medicinal Chemistry 12/2007; 50(22):5364-71., DOI:10.1021/jm070728r

**Andrea Carotti**, Modesto de Candia, Marco Catto, Tatiana N Borisova, Alexey V Varlamov, Estefanía Méndez-Alvarez, Ramón Soto-Otero, Leonid G Voskressensky, Cosimo Altomare: *Ester derivatives of annulated tetrahydroazocines: A new class of selective acetylcholinesterase inhibitors.* Bioorganic & Medicinal Chemistry 11/2006; 14(21):7205-12., DOI:10.1016/j.bmc.2006.06.055

Marco Catto, Orazio Nicolotti, Francesco Leonetti, Andrea Carotti, Angelo Danilo Favia, Ramón Soto-Otero, Estefanía Méndez-Alvarez, Angelo Carotti: *Structural Insights into Monoamine Oxidase Inhibitory Potency and Selectivity of 7-Substituted Coumarins from Ligand- and Target-Based Approaches.* Journal of Medicinal Chemistry 09/2006; 49(16):4912-25., DOI:10.1021/jm060183l

Raimondo De Cristofaro, Andrea Carotti, Sepideh Akhavan, Roberta Palla, Flora Peyvandi, Cosimo Altomare, Pier Mannuccio Mannucci: *The natural mutation by deletion of Lys9 in the thrombin A-chain affects the PKa value of catalytic residues, the overall enzyme's stability and*

*conformational transitions linked to Na binding*. FEBS Journal 02/2006; 273(1):159-69., DOI:10.1111/j.1742-4658.2005.05052.x

Agostino De Marco, Modesto De Candia, Andrea Carotti, Saverio Cellamare, Erica De Candia, Cosimo Altomare: *Lipophilicity-related inhibition of blood platelet aggregation by nipecotic acid anilides*. European Journal of Pharmaceutical Sciences 07/2004; 22(2-3):153-64., DOI:10.1016/j.ejps.2004.03.003

Raimondo De Cristofaro, Sepideh Akhavan, Cosimo Altomare, Andrea Carotti, Flora Peyvandi, Pier Mannuccio Mannucci: *A Natural Prothrombin Mutant Reveals an Unexpected Influence of A-chain Structure on the Activity of Human -Thrombin*. Journal of Biological Chemistry 04/2004; 279(13):13035-43., DOI:10.1074/jbc.M312430200

**Andrea Carotti**, Cosimo Altomare, Luisa Savini, Luisa Chiasserini, Cesare Pellerano, Maria P Mascia, Elisabetta Maciocco, Fabio Busonero, Manuel Mamelì, Giovanni Biggio, Enrico Sanna: *High affinity central benzodiazepine receptor ligands. Part 3: Insights into the pharmacophore and pattern recognition study of intrinsic activities of pyrazolo[4,3-c]quinolin-3-ones*. Bioorganic & Medicinal Chemistry 12/2003; 11(23):5259-72., DOI:10.1016/S0968-0896(03)00527-3

Leonid G Voskressensky, Modesto de Candia, Andrea Carotti, Tatiana N Borisova, Larisa N Kulikova, Alexey V Varlamov, Cosimo Altomare: *Investigation on the antiplatelet activity of pyrrolo[3,2-c]pyridine-containing compounds*. Journal of Pharmacy and Pharmacology 04/2003; 55(3):323-32., DOI:10.1211/002235702676

Angelo Carotti, Antonio Carrieri, Stefano Chimichi, Marco Boccalini, Barbara Cosimelli, Carmela Gnerre, Andrea Carotti, Pierre Alain Carrupt, Bernard Testa: *Natural and synthetic geiparvarins are strong and selective MAO-B inhibitors. Synthesis and SAR studies*. Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters 01/2003; 12(24):3551-5., DOI:10.1016/S0960-894X(02)00798-9

Antonio Carrieri, Andrea Carotti, M Letizia Barreca, Cosimo Altomare: *Binding models of reversible inhibitors to type-B monoamine oxidase*. Journal of Computer-Aided Molecular Design 12/2002; 16(11):769-78., DOI:10.1023/A:1023815426730