

PROF. MARIA LETIZIA BARRECA

(CV aggiornato a 02/11/2021)

POSIZIONE ACCADEMICA

Settore Scientifico Disciplinare CHIM/08 - Chimica farmaceutica

Qualifica Professore Associato

Sede universitaria Università degli Studi di PERUGIA **Dipartimento** di SCIENZE FARMACEUTICHE

Telefono +39 075 5855157

Fax +39 075 5855115

E-mail: maria.barreca@unipg.it

Webite: <https://www.unipg.it/personale/maria.barreca>; <https://d2medchem.wixsite.com/unipg>;

<https://www.sibyllabiotech.it/>

In possesso di Abilitazione nazionale (tornata 2016) per il settore concorsuale 03/D1 – CHIMICA E TECNOLOGIE FARMACEUTICHE, TOSSICOLOGICHE E NUTRACEUTICO-ALIMENTARI. Idoneità di professore di I Fascia (ordinario) conseguita in data 04 Aprile 2018

ISTRUZIONE

1996: Conseguimento del titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Farmaceutiche (IX Ciclo) presso l'Università degli Studi di Messina.

1996: Abilitazione all'esercizio della professione di Farmacista.

1992: Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche (110/110 e lode) presso l'Università degli Studi di Messina

ESPERIENZE PROFESSIONALI

01/12/2016-presente Professore di II fascia (SSD CHIM-08), Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Università degli Studi di Perugia

1/11/2007-30/11/2016: Ricercatore universitario (SSD CHIM-08), Facoltà di Farmacia e poi dal 2014 Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Università degli Studi di Perugia

7/4-31/10/2007: Visiting scientist presso il Laboratorio di Chemiometria e Chemioinformatica del Prof. Gabriele Cruciani, Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Perugia

30/3/2000-28/8/2001: Fellowship per attività di ricerca (30/03/2000-14/05/2000) all'interno del "Programma di scambi internazionali per la mobilità di breve durata (CNR Short – Term Mobility)" svolto presso il Department of Biology and Biochemistry, Università di Houston, Texas, USA. (Alla fine del fellowship, la Prof. Barreca ha prolungato il suo soggiorno all'Università di Houston come visiting scientist fino a agosto 2001)

4/3/1999-31/10/2007: Ricercatore universitario (SSD CHIM-08), Dipartimento Farmaco-Chimico, Facoltà di Farmacia, Università degli Studi di Messina

1997-98: Post-doc in "Scienze Farmaceutiche" presso il Dipartimento Farmaco-Chimico dell'Università di Messina

1993: Borsista della "Fondazione Bonino-Pulejo" presso i laboratori di ricerca del Dipartimento Farmaco-Chimico della Facoltà di Farmacia dell'Università di Bari. In seguito, negli stessi laboratori è stata espletata anche parte delle attività del dottorato di ricerca.

INCARICHI ACCADEMICI RICOPERTI

2019-presente: Delegato per il settore "Terza Missione" del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Università di Perugia (DSF-UNIPG)

2013-presente: Responsabile AQ (Assicurazione della Qualità) del CdLM in Biotecnologie Farmaceutiche (DSF-UNIPG)

2016-presente: Componente del Comitato di indirizzo del CdLM in Biotecnologie Farmaceutiche (DSF-UNIPG).

2019-presente: Componente della Commissione Didattica del DSF-UNIPG.

2017-presente: Componente della Commissione per la ripartizione dei fondi per il funzionamento dei laboratori didattici del DSF-UNIPG

2004-2005: Segretario del Corso di Laurea Specialistica in CTF, Università di Messina.

PERIODI DI CONGEDO

15/7/2008-17/12/2008: Congedo per maternità (Legge 30/12/71 n. 1204). Provvedimento di concessione: N.120 del 24/02/2009

07/04/2007-31/10/2007: Congedo straordinario per motivi di studio e di ricerca scientifica (Laboratorio di Chemiometria e Chemioinformatica, Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Perugia). Provvedimento di concessione: Prot. N.43502 del 6/6/2007

7/1/2007-7/4/2007: Aspettativa per famiglia (art. 69 D.P.R. 10/1/57 n. 3). Provvedimento di concessione: Prot. 8300 del 12/02/2007 (Congedo Parentale)

16/10/2006-16/11/2006: Aspettativa per famiglia (art. 69 D.P.R. 10/1/57 n. 3). Provvedimento di concessione: Prot. 8300 del 12/02/2007 (Congedo parenterale)

10/5/2006-10/10/2006: Congedo per maternità (Legge 30/12/71 n. 1204). Provvedimento di concessione: Prot. 832 del 04/01/2006

30/3/2000-30/3/2001: Congedo straordinario per motivi di studio e di ricerca scientifica (Department of Biology and Biochemistry, University of Houston, Texas, USA)

ATTIVITA' DI RICERCA SCIENTIFICA

A. INDICATORI BIBLIOMETRICI (dati al 2/11/2021)

Numero di pubblicazioni =96

Numero totale Citazioni = 3288

H-index = 34 (Scopus), 37 (Google Scholar)

B. ORGANIZZAZIONE, DIREZIONE E COORDINAMENTO DI GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI, OVVERO PARTECIPAZIONE AGLI STESSI

03/1999 – 10/2007: attività di ricerca presso il Dipartimento Farmaco-Chimico dell'Università degli Studi di Messina, dove la Prof. Barreca ha avviato un laboratorio nell'ambito della chimica computazionale applicata al drug discovery.

10/2007-presente: attività di ricerca presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università degli Studi di Perugia, dove la candidata ha avuto la responsabilità di creare e dirigere il laboratorio di In silico Drug Discovery (I2D Lab).

Le ricerche condotte dalla Prof. Barreca rientrano nel settore "chimico farmaceutico" e si avvalgono di collaborazioni multidisciplinari/interdisciplinari con centri di ricerca ed università nazionali e internazionali, con aziende e con altri dipartimenti dell'Ateneo di appartenenza. In particolare, le attività di ricerca riguardano principalmente l'applicazione/sviluppo di metodologie avanzate di modellistica molecolare, chimica computazionale, chemioinformatica e library design al fine di: 1) studiare le relazioni struttura-funzione di macromolecole d'interesse biologico; 2) identificare ed ottimizzare nuovi composti bioattivi attraverso la progettazione razionale ligand- and target-based, la caratterizzazione delle relazioni struttura-attività nonché il virtual screening; 3) comprendere i fattori determinanti il binding di un ligando al target biologico, 5) predire le proprietà chimico-fisiche e la farmacocinetica di composti di interesse farmaceutico, e più recentemente 6) sviluppare modelli predittivi di machine learning.

C. PRINCIPALI LINEE DI RICERCA E COLLABORAZIONI SCIENTIFICHE

FINO A OTTOBRE 2007 (UNIVERSITÀ DI MESSINA):

	INFEZIONI VIRALI (HIV)
Target esplorati	Trascrittasi Inversa e Integrase
Collaborazioni	- Prof. Jan Balzarini, Prof. Christophe Pannecouque, Prof. Myriam Witvrouw, Dr Frauke Christ, Prof. Zeger Debyser, Prof. Leyssen, Prof. Jan Paeshuyse, Prof. Johan Neyts e Prof. Erik De Clercq (Rega Institute for Medical Research and Molecular Virology and Gene Therapy Molecular Medicine, Katholieke Universiteit Leuven, Belgio) - Dr. Giovanni Maga (Istituto di Genetica Molecolare IGM-CNR, Pavia) - Dr Andrea Savarino (Dipartimento di Malattie Infettive Parassitarie ed Immunomediate, Istituto Superiore di Sanità, Roma)

Pubblicazioni (come da elenco completo delle pubblicazioni)	65,66,68-72,76-78,83,87,89,90, 92-95
Progetti finanziati (come da lista al punto D)	21-24, 26, 27, 29,30

	EPILESSIA
Target esplorati	Recettore AMPA
Collaborazioni	Prof. Giovambattista De Sarro e Dr Emilio Russo (Dipartimento di Medicina Sperimentale e Clinica, Università` Magna Græcia, Catanzaro)
Pubblicazioni (come da elenco completo delle pubblicazioni)	67,73,74,79-82,84-86,88
Progetti finanziati (come da lista al punto D)	20, 25, 28

DA NOVEMBRE 2007 (UNIVERSITÀ DI PERUGIA):

	INFEZIONI VIRALI (HIV, INFLUENZA, HCV E FLAVIVIRUS)
Target esplorati	HIV: Integrasi, complesso LEDGF/p75-Integrasi, Tat HCV: NS5B polimerasi Flavivirus: NS5 polimerasi e complesso NS5-NS3 Influenza: NS1 e polimerasi (PA-PB1)
Collaborazioni	<ul style="list-style-type: none"> - Prof. Jan Balzarini, Prof. Christophe Pannecouque, Prof. Myriam Witvrouw, Dr Frauke Christ, Prof. Zeger Debyser, Prof. Leyssen, Prof. Jan Paeshuyse, Prof. Johan Neyts e Prof. Erik De Clercq (Rega Institute for Medical Research and Molecular Virology and Gene Therapy Molecular Medicine, Katholieke Universiteit Leuven, Belgio) - Dr. Giovanni Maga (Istituto di Genetica Molecolare IGM-CNR, Pavia) - Dr. Andrea Savarino (Dipartimento di Malattie Infettive Parassitarie ed Immunomediate, Istituto Superiore di Sanità, Roma) - Dr Neerja Kaushik-Basu, Department of Biochemistry and Molecular Biology, UMDNJ-New Jersey Medical School, Newark, New Jersey 07103, USA) - Prof. Subhash Vasudevan (Duke-NUS Medical School, Singapore) - Dr. Guilles Querat (Emergence des Pathologies Virales, Aix-Marseille University, IRD French Institute of Research for Development, Marseille, Francia) - Prof. Alexander Kurkin (Chemistry Department of Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia) - Dr. Andrea Altieri (EDASA Scientific Srls., San Salvo - Chieti) - Dr. Mario Milani e Dr. Eloise Mastrangelo (CNR-Biophysics Institute, Milano) - Dr. Andrea Savarino e Dr Marco Sgarbanti (Dipartimento di Malattie Infettive Parassitarie ed Immunomediate, Istituto Superiore di Sanità, Roma) - Prof. N. David Frick (Department of Chemistry and Biochemistry, University of Wisconsin-Milwaukee, Milwaukee, WI, USA)
Pubblicazioni (come da elenco completo delle pubblicazioni)	2,3,9,13,17,18, 25,29-32,38-43, 46-49, 51-64
Progetti finanziati (come da lista al punto D)	5, 6, 13-19

	RESISTENZE BATTERICHE
Target esplorati	Pompa di efflusso di <i>Staphylococcus aureus</i> (<i>S. aureus</i>) e di <i>Mycobacterium avium</i>
Collaborazioni	<ul style="list-style-type: none"> - Prof. Glenn W Kaatz (Department of Internal Medicine, Division of Infectious Diseases, School of Medicine, Wayne State University and the John D. Dingell Department of Veterans Affairs Medical Center, Detroit, Michigan) - Prof. Francesca Biavasco (Department of Life and Environmental Sciences, Università Politecnica delle Marche, Ancona) - Prof. Stefano Moro (Department of Pharmaceutical and Pharmacological Sciences, University of Padova)
Pubblicazioni (come da elenco completo delle pubblicazioni)	4,6,10,14,15,19,20,24,26,27,45
Progetti finanziati (come da lista al punto D)	11

	MALATTIE NEURODEGENERATIVE (MALATTIE DA PRIONI E SCLEROSI MULTIPLA)
Target esplorati	Proteina Prionica e altro target in fase di identificazione
Collaborazioni	<ul style="list-style-type: none"> - Prof. Emiliano Biasini (Dulbecco Telethon Laboratory of Prions and Amyloids, Centre for Integrative Biology - CIBIO, Università degli Studi di Trento) - Prof. Jesús R. Requena e Dr. Eduardo Domínguez Medina (BioFarma-USEF Research Group University of Santiago de Compostela Center for Research in Molecular Medicine and Chronic Diseases - CIMUS, Santiago de Compostela, Spagna) - Prof. Joaquín Castilla (IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, Bilbao, Spagna) - Prof. Francesca Fallarino (Dipartimento di Medicina e Chirurgia, UNIPG) - Prof. Pietro Faccioli (Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Trento) - Prof. Graziano Lolli (Laboratory of Protein Crystallography and Structure-Based Drug Design, Centre for Integrative Biology - CIBIO, Università degli Studi di Trento) - Dr. Romolo Nonno (Department of Veterinary Public Health and Food Safety, Istituto Superiore di Sanità, Roma)
Pubblicazioni (come da elenco completo delle pubblicazioni)	1,7,11,21,28,33
Progetti finanziati (come da lista al punto D)	3, 4, 7-9,12
Brevetti (come da lista nelle attività di Terza Missione)	1, 2, 6

	INFIAMMAZIONE
Target esplorati	p38 MAPK
Collaborazioni	<ul style="list-style-type: none"> - Prof. Stefan Laufer (Department of Pharmaceutical and Medicinal Chemistry, Institute of Pharmacy, Tuebingen, Germania) - Prof. Daniel Rauh (Chemical Genomics Centre, Max Planck Institute of Molecular Physiology, Otto-Hahn-Strasse 15, 44227, Dortmund, Germania) - Dr. Jose Brea e Prof. Isabel Loza Garcia (CIMUS Research Center, University of Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, Spagna) - Prof. Francesca Fallarino (Dipartimento di Medicina e Chirurgia, UNIPG)
Pubblicazioni (come da elenco completo delle pubblicazioni)	12,16, 22, 34, 35, 37
Progetti finanziati (come da lista al punto D)	2

	CANCRO
Target esplorati	IL4i1, AKT1 e TDP1
Collaborazioni	<ul style="list-style-type: none"> - Prof. Francesca Fallarino e Prof. Maria Paola Martelli (Dipartimento di Medicina e Chirurgia, UNIPG) - Prof. Mariangela Morlando (Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, UNIPG) - Dr. Jose Brea e Prof. Isabel Loza Garcia (CIMUS Research Center, University of Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, Spagna) - Dr Yves Pommier (Developmental Therapeutics Branch and Laboratory of Molecular Pharmacology, Center for Cancer Research, National Cancer Institute, NIH, Bethesda, USA)
Progetti finanziati (come da lista al punto D)	1, 10

D. RESPONSABILITA'/PARTECIPAZIONE SCIENTIFICA A PROGETTI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI

Principal Investigator/Co-Investigator

1. **2021-2022:** Il Dr. Andrea Astolfi (applicant), già postdoc nel I2D Lab, è uno dei vincitori del bando "Post-doctoral fellowship 2021" di Fondazione Umberto Veronesi. La prof. Barreca è ufficialmente il principal investigator del progetto sottomesso: "Tuning the Precision Oncology on the PI3K/AKT/mTOR pathway". Inizio: 01-04-2021-presente (principal investigator)

2. **2018-2019:** Fondi di Ateneo per la ricerca di base 2018: "A multidisciplinary approach to the discovery of p38 α MAPK inhibitors". 24-07-2018 a 24-06-2019 (principal investigator)
3. **2016-2017:** Pilot Grant 2016, National Multiple Sclerosis Society, New York (USA): "Targeting cellular prion protein in multiple sclerosis". 01-09-2016 al 30-08-2017 (co-investigator)

Responsabile Scientifico di Unità Operativa UNIPG

4. **2013-2016:** Ricerca Finalizzata 2010 (GR-2010-2312769), Ministero della Salute: Designing molecular chaperones for proteins: a new strategy for drug discovery in neurodegenerative diseases. 12-06-2013 al 11-06-2016.
5. **2011-2013:** Programma per la ricerca AIDS 2009-2010: Discovery of innovative Tat-mimic compounds to be used in HIV-1 eradication strategies. 06-04-2011 al 30-06-2013.
6. **2008-2012:** Progetto europeo THINC (Targeting HIV integration co-factors, targeting cellular proteins during nuclear import or integration of HIV) - FP7-HEALTH-2007. 01-03-2008 al 29-02-2012.

Membro di Unità Operativa

7. **2021-presente:** EU-OPENSUREEN-DRIVE Chemoproteomics and Mass Spectrometry Imaging (MSI) Call 2021 - Identification of the Pharmacological Target of Compounds Modulating the Activity of the Cellular Prion Protein (CHEMPRION). 1/10/2021-presente
8. **2020-2023.** FISM 2019 - Research Project - Single Centre 2019: "Targeting cellular prion protein in multiple sclerosis" 1/03/2020-28/02/2023
9. **2021-2024:** Grant Telethon 2020: "Sviluppo di farmaci in grado di promuovere la degradazione cellulare della proteina prionica". 1/10/2021-30/09/2024
10. **2018-2022:** AIRC Investigator Grant - IG 2017: Tackling Interleukin 4 Induced 1, IL4i1, as a novel target enzyme for tumor immunotherapy. 1-01-2018 a 31-12-2022
11. **2017-2018:** Progetto Pilota Fondazione Ricerca Fibrosi Cistica: "Identification of new efflux pumps inhibitors able to contrast nontuberculous mycobacterial infections in cystic fibrosis patients" (FFC#17/2017). 01-09-2017 a 31-08-2018
12. **2017-2018:** Fondazione Cassa di Risparmio di Perugia: "Riduzione della neurotossicità indotta dalla proteina prionica con molecole a struttura eterociclica: implicazioni nella malattia di Alzheimer". 01-06-2017 al 31-05-2018
13. **2016-2017:** Fondi di Ateneo per la ricerca di base 2015: "Sviluppo di inibitori dell'interazione PA/PB1 della polimerasi dell'influenza come nuovi agenti antivirali" 12-05-2016 a 12-05-2017
14. **2013-2016:** PRIN 2010-11: Bloccare la replicazione di HIV-1 attraverso un approccio rivolto verso diversi bersagli molecolari. 01-02-2013 al 01-02-2016
15. **2012-2014:** "Discovery of influenza A virus non-structural protein 1 (NS1) inhibitors" finanziato dal Ministero della Salute. 01-06-2012 al 31-05-2014
16. **2011-2013:** "Discovery of Tat-mimicking compounds to fight HIV latency" finanziato dalla Fondazione Bill & Melinda Gates. dal 01-09-2011 al 01-03-2013
17. **2010-2012:** PRIN-2008: Inibitori della regolazione trascrizionale dell'HIV. 22-03-2010 al 22-09-2012
18. **2010-2011:** "Come contrastare la pandemia influenzale: individuazione di nuovi farmaci efficaci" finanziato dal Ministero della Salute. 02/02/2010 al 01-08-2012
19. **2009-2011:** Fondazione Roma 2009: Intracellular protein-protein interactions regulating viral replication as targets for novel antiviral strategies. 01-06-2009 al 31-05-2011
20. **2006:** Programma di Ricerca di Ateneo-2005: Design, sintesi e SAR di agenti neuroprotettivi. Durata: 12 mesi 01-01-2006 al 31-12-2006
21. **2006:** Programma di Ricerca di Ateneo-2005: Design, sintesi e SAR di nuovi inibitori della trascrittasi inversa e dell'integrasi dell'HIV-1. 01-01-2006 al 31-12-2006
22. **2004-2007:** FP6-HEALTH-2003 – EU project TRIoH (Targeting Replication and Integration of HIV). 01-01-2004 al 30-06-2007
23. **2004-2006:** PRIN-2004: Molecular modeling, design e sintesi di potenziali agenti anti-AIDS. 30-11-2004 al 29-11-2006
24. **2005-2006:** Programma di Ricerca di Ateneo-2004: Progettazione, sintesi e valutazione biologica di nuovi inibitori della trascrittasi inversa (RT) e della integrasi (IN) dell'HIV-1. 01-01-2005 al 31-12-2006
25. **2004:** Programma di Ricerca di Ateneo-2003: Antagonisti del recettore AMPA: Disegno razionale, sintesi e SAR. 01-01-2004 al 31-12-2004
26. **2004:** Programma di Ricerca di Ateneo-2003: Progettazione, sintesi e valutazione biologica di nuovi inibitori della trascrittasi inversa e dell'integrasi dell'HIV-1. dal 01-01-2004 al 31-12-2004
27. **2002-2004:** PRIN-2002: Molecular modeling, design e sintesi di potenziali agenti anti-AIDS. 16-12-2002 al 15-12-2004
28. **2003:** Programma di Ricerca di Ateneo-2002: Sintesi e Molecular Modeling di AMPA-antagonisti. 01-01-2003

al 31-12-2003

29. **2003:** Programma di Ricerca di Ateneo-2002: Progettazione, sintesi e valutazione biologica di nuovi inibitori della trascrittasi inversa e dell'integrasi dell'HIV-1. 01-01-2003 al 31-12-2003
30. **2000-2002:** PRIN-2000: Molecular modeling, design e sintesi di potenziali agenti anti-AIDS. 20-12-2000 al 19-12-2002

E. PREMI E RICONOSCIMENTI NAZIONALI E INTERNAZIONALI PER L'ATTIVITA' DI RICERCA

09/01/2018: La prof. Barreca è stata inserita nell'elenco dei Top Italian Scientists (TIS) della VIA-Academy (Area: chemistry-medicine; Macroarea: Chemistry)

07/12/2016: Primo Premio alla "BioSolveIT's scientific challenge winter 2015" (durata della 3-step challenge: Dicembre 2015-Dicembre 2016), organizzato da BioSolveIT GmbH (Germania). Progetto premiato: "*Identification of pharmacological chaperones for cellular prion protein*"

21/1/2015: Elogio da parte di ChemMedChem per il full paper "*Pharmacophore-based discovery of small-molecule inhibitors of protein-protein interactions between HIV-1 integrase and cellular cofactor LEDGF/p75*", uno tra i top 10 più citati articoli pubblicati nel 2009.

14/9/2008: Premio 'Società Chimica Italiana-Farmindustria' per il miglior giovane ricercatore in Chimica Farmaceutica

5/10/2007: "James Kaminsky Award" per la migliore presentazione orale al "10th EU Catalyst User Group Meeting 2007 and Advanced Seminars in Catalyst", Messina. Presentazione premiata: *Pharmacophore modelling approaches to the discovery of novel HIV-1 integrase inhibitors*

5/4/2002: Primo premio per il miglior poster al MGMS Annual International Meeting 2002-Biomolecular Interactions, Bristol (UK). Poster premiato: *Computational approaches in discovering novel anti-AIDS agents*

F. CAPACITÀ DI COINVOLGERE E FORMARE GIOVANI RICERCATORI

2021-presente: mentore (su invito) di PhDs/Postdocs all'interno del "EFMC-YSN Mentoring Programme - 2021".

2014-presente: Supervisore di tre dottorandi in "Scienze Farmaceutiche" a profilo internazionale (Andrea Astolfi - XXX ciclo, Maria Sole Burali - XXXIII ciclo e Deborah Palazzotti - XXXV ciclo), che hanno ricevuto riconoscimenti scientifici quali:

22-24/07/2020: il poster "Small-molecule inhibitors targeting AKT1 active and allosteric sites" presentato da Deborah Palazzotti è stato selezionato come uno dei migliori nel primo Italian Medicinal Chemistry Virtual Meeting (I-YMC-VMet). Deborah Palazzotti è stata invitata a illustrare i contenuti del poster in una breve presentazione orale virtuale.

19-24/05/2019: il poster "Deciphering molecular recognition mechanism of multidrug resistance *Staphylococcus aureus* NorA efflux pump using a Supervised Molecular Dynamics approach" presentato da Deborah Palazzotti è stato selezionato come uno dei migliori poster al 12° European Workshop of Drug Design (EWDD), Siena. Deborah Palazzotti è stata invitata a illustrare i contenuti del poster in una breve presentazione orale.

17/07/2018: La tesi di dottorato del Dr. Astolfi "Targeting p38 α MAPK and NorA Efflux Pump: from Structural Analysis to Inhibitor Identification" è stata premiata come miglior lavoro di tesi di dottorato in Chimica Farmaceutica. Questo premio nazionale è stato riconosciuto dalla Società Chimica Italiana, Divisione di Chimica Farmaceutica.

12/07/2018: Il Dr. Astolfi ha ricevuto il certificato Paul Ehrlich MedChem Euro-PhD Network per l'eccellenza del suo lavoro di tesi di dottorato.

16/12/2016: Il progetto "Structure-Based optimization of a new chemical scaffold acting as p38 α MAPK inhibitor" presentato dal Dr Astolfi ha partecipato alla "Winter Challenge 2015 - BioSolveIT's scientific challenge" organizzata da BioSolveIT GmbH (Germania), e si è classificato tra i migliori tre progetti presentati.

21/05/2015: Il poster "Structure-Based Insights Into p38 α MAPK: From Crystal Structures Analysis to Hit Optimization." presentato dal Dr Astolfi è stato selezionato come uno dei migliori cinque poster al 10° Workshop Europeo di Drug Design (EWDD), Siena, e il Dr Astolfi è stato invitato a tenere una breve presentazione orale

2011-2012: Responsabile scientifico di una borsa di studio della durata di 5 mesi (dicembre 2011-aprile 2012) assegnata al Dr. Luca Sancineto per lo svolgimento del progetto dal titolo "Sintesi di composti ad attività antivirale".

2009-presente: La Prof. Barreca è stato/è il supervisore scientifico delle attività di assegnisti di ricerca, i cui contratti sono stati attivati con fondi di progetti di cui la professoressa era/è PI/Responsabile di UO/membro di UO (come da lista al punto D). In particolare, svolgono/hanno svolto attività di ricerca nel I2D Lab:

01/04/2021-presente: Dr Andrea Astolfi, vincitore del "Post-doctoral fellowship 2021" di Fondazione Umberto

Veronesi. Titolo progetto: "Tuning the Precision Oncology on the PI3K/AKT/mTOR pathway"

1/04/2018-31/03/2021: Dr Andrea Astolfi, destinatario di 3 assegni di ricerca successivi nell'ambito del progetto "Ruolo dell'enzima IL4i1 come un nuovo bersaglio nell'immunoterapia tumorale" ("AIRC Investigator Grant - IG 2017)

1/12/2017-28/02/2018: Dr Andrea Astolfi, destinatario di 1 borsa di studio nell'ambito del progetto "Identification of new efflux pump inhibitors able to contrast nontuberculous mycobacterial infections in cystic fibrosis patients" (Progetto Pilota Fondazione Ricerca Fibrosi Cistica)

15/06/2013-14/06/2015: Dr. Nunzio Iraci, destinatario di 2 assegni di ricerca successivi nell'ambito del progetto "Designing molecular chaperones for proteins: a new strategy for drug discovery in neurodegenerative diseases" (Ricerca Finalizzata 2010 - GR-2010-2312769)

01/06/2012-31/05/2013: Dr. Nunzio Iraci, assegno di ricerca nell'ambito del progetto "Discovery of influenza A virus non-structural protein 1 (NS1) inhibitors" finanziato dal Ministero della Salute

15/05/2010-02/05/2012: Dr. Nunzio Iraci, destinatario di 2 assegni di ricerca successivi nell'ambito del progetto "Come contrastare la pandemia influenzale: individuazione di nuovi farmaci efficaci" finanziato dal Ministero della Salute

15/03/2009-14/03/2010: Dr. Nunzio Iraci, assegno di ricerca nell'ambito del progetto THINC (FP7-HEALTH-2007) "Targeting HIV integration co-factors, targeting cellular proteins during nuclear import or integration of HIV"

2008-presente: Supervisore di diversi studenti del CdLM in Biotecnologie Farmaceutiche per lo svolgimento di attività di "Tirocinio pratico-applicativo" nel I2D Lab

2001-presente: Relatore/controrelatore di numerose tesi di laurea sperimentali di laureandi dei CdLS/CdLM in Farmacia, CTF e Biotecnologie Farmaceutiche

06/2013-10/2014: Supervisore di una borsa di studio post-laurea (POR Umbria FSE 2007-2013) assegnata alla Dr Rosy Gaetani. Titolo progetto: "Computational approaches for the identification and optimization of new inhibitors of HCV NS5B polymerase"

G. PARTECIPAZIONE A SOCIETÀ SCIENTIFICHE E ORGANISMI DI VALUTAZIONE

2013-presente: membro della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana

2021: Revisore per il MIUR (Reprise) per la valutazione di progetti di ricerca

2011-2018: Research Grant Reviewer per la Research Foundation – Flanders (FWO)

2015: Scientific Reviewer for LinkSCEEM & Cy-Tera Joint Call for Proposals for HPC access

H. ATTRIBUZIONE DI INCARICHI DI RICERCA (FELLOWSHIP) PRESSO ISTITUTI DI RICERCA ESTERI

30/3/2000-14/5/2000: Fellowship per attività di ricerca all'interno del "Programma di scambi internazionali per la mobilità di breve durata (CNR Short – Term Mobility)" (Prot. 010376) svolto presso il Department of Biology and Biochemistry, Università di Houston, Texas, USA

I. PARTECIPAZIONE A COMITATI EDITORIALI DI RIVISTE

1/2019-presente: membro del *ACS Medicinal Chemistry Letters* Editorial Advisory Board

1/2012-2/2014: membro del *ISRN Virology* Editorial Board, fino alla fusione di questa rivista con altre della ISRN serie, per dar vita alla nuova rivista "International Scholarly Research Notices", per la quale la sottoscritta ha rifiutato l'invito a far parte dell'Editorial Board.

L. ORGANIZZAZIONE DI CONVEGNI/WORKSHOP NAZIONALI E INTERNAZIONALI

2019: Membro del comitato scientifico del "XII European Workshop in Drug Design" (XII EWDD), 19-24 Maggio, Certosa di Pontignano (Siena). La prof. Barreca è membro confermato anche della prossima edizione del workshop (13EWDD), che si terrà alla Certosa di Pontignano dal 23 al 27 maggio 2022.

2016: Membro del comitato organizzativo del "XXIV National Meeting in Medicinal Chemistry" e del "10th Young Medicinal Chemist's Symposium", 12-14 Settembre, Perugia.

2016: Co-organizzatore della sessione "In-silico Drug Design and in-silico screening" (invito come Track Chair),

Drug Discovery & Therapy World Congress 2016, 22-25 Agosto, Boston, USA

2007: Membro del comitato scientifico e organizzativo del "10th EU Catalyst User Group Meeting and Advanced Seminars in Catalyst", 4-5 Ottobre, Messina.

M. RELATORE A CONVEGNI/WORKSHOP NAZIONALI E INTERNAZIONALI

2019: "Spin off Sibylla Biotech" – Workshop "Trasferimento Tecnologico" organizzato dalla Divisione di Chimica Farmaceutica (SCI), Istituto Italiano di Tecnologia (IIT), Genova

2018: "Pocket-based drug discovery in inflammatory and neurodegenerative diseases" - Workshop "Proteins as drug targets, proteins as drugs and protein degradation as a therapeutic strategy", University of Salerno

2012: "Accounting for Water Molecules in HCV Drug Discovery". Frontiers in Water Biophysics, 23-26 Settembre, Perugia

2011: "Drug Discovery Program at MML-UNIPG". Computationally Driven Drug Discovery, 21-23 Novembre, L'Aquila

2008: "Overview of ML Barreca's research activities" (come vincitore del premio Farmaindustria). XIX National Meeting of the Division of Pharmaceutical Chemistry of the Italian Chemical Society, 14-18 Settembre, Verona.

2007: "Pharmacophore modelling approaches to the discovery of novel HIV-1 integrase inhibitors". 10th EU Catalyst User Group Meeting 2007 and Advanced Seminars in Catalyst, 4-5 Ottobre, Messina.

2007: "Discovery of novel HIV-1 Integrase Inhibitors: a multidisciplinary approach". Targeting Replication and Integration of HIV, Fourth General Assembly and Open Symposium, 11-12 Giugno, Leuven, Belgio.

2005: "Rational design, synthesis and SAR of HIV-1 integrase Inhibitors". Targeting Replication and Integration of HIV, Scientific Symposium, 23 Marzo, Frankfurt am Main, Germania.

2003: "Rational design and synthesis of novel NNRTI TBZ analogues". Polish-Austrian-German-Hungarian-Italian Joint Meeting on Medicinal Chemistry, 15-18 Ottobre, Kraków, Polonia.

2002: "Discovery of novel HIV-1 integrase inhibitors through computational strategies." XVI Convegno Nazionale Divisione Chimica Farmaceutica SCI, 18-22 Settembre, Sorrento.

2001: "Molecular dynamics studies of the HIV-1 integrase". First Magna Græcia Medicinal Chemistry Workshop on New Perspectives in Drug Research, 10-13 Giugno, Copanello (CZ).

1999: "Modellistica Strutturale e disegno di inibitori dell'integrasi dell'HIV-1". Convegno Regionale della Società Chimica Italiana, 16 Dicembre, Catania.

1996: "Studi QSAR e 3D-QSAR dell'inibizione MAO e della ricognizione chirale molecolare". XVI Corso Avanzato in Chimica Farmaceutica e Seminario Nazionale per dottorandi "E.Duranti", 2-6 Luglio, Urbino.

1996: "Modellistica molecolare di inibitori nonnucleosidici della RT". Convegno Regionale della Società Chimica Italiana-Sezione Sicilia, 19-20 Dicembre, Catania.

N. ATTIVITA' DI REFERAGGIO PER RIVISTE SCIENTIFICHE

Journal of Medicinal Chemistry, Journal of Chemical Information and Modelling, European Journal of Medicinal Chemistry, ACS Medicinal Chemistry Letters, Bioorganic & Medicinal Chemistry, Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, Journal of Computer-Aided Molecular Design, Drug Discovery Today, Expert Opinion on Drug Discovery, Computational Biology and Chemistry: Advances and Applications, Theoretical Chemistry Accounts, Tetrahedron, Epilepsia, Acta Pharmacologica Sinica, Molecules, Future Medicinal Chemistry, Scientific Reports, Antiviral Research, Journal of Molecular Graphics and Modelling, ChemMedChem, Current Medicinal Chemistry

ATTIVITA' DI TERZA MISSIONE

A. IMPRENDITORIALITÀ ACCADEMICA E BREVETTI

05/10/2017-presente. Co-fondatore e membro del Scientific Board della Start-up innovativa Sibylla Biotech S.R.L., (<https://www.sibyllabiotech.it/>) attualmente spin off dell'Università degli Studi di Perugia, dell'Università di Trento e dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare. Sibylla Biotech si inserisce nel mercato della ricerca farmaceutica a livello preclinico, avendo sviluppato un approccio innovativo per la scoperta di potenziali farmaci (PPI-FIT - Pharmacological Protein inactivation by Targeting Folding Intermediates).

Attualmente, Sibylla Biotech ha 9 dipendenti e ha recentemente raggiunto i seguenti traguardi:

- a novembre 2019, ha incassato un round seed da 2,4 milioni di euro, sottoscritto dal fondo Vertis Venture 3 Technology Transfer.
- a maggio 2021, ha annunciato una collaborazione di ricerca con Takeda Pharmaceutical Company Limited per identificare piccole molecole innovative in grado di modulare l'attività di bersagli farmacologici selezionati.
- a giugno 2021, è stata una delle otto finaliste per il prestigioso premio "The Spinoff Prize 2021" di Nature (<https://www.nature.com/articles/d41586-021-01668-7>)
- ottobre 2021, è stata selezionata come finalista dell'acceleratore SDG per le donne fondatrici.

1. **2014-presente.** Brevetto internazionale WO/2014/025785, "Prion protein ligands as therapeutic agents for neurodegenerative disorders". Autori: Biasini, E., Harris, D.A., Beeler, A., Fluharty, B.R., Barreca M.L., Iraci. N. Ingham, O. Co-titolari: UNIPG: 30%, Boston University: 70%
2. **27/03/2020:** Patent application ITA N 10202000006517, "Small molecules inducing the degradation of the cellular prion protein". Autori: E. Biasini, ML Barreca, P. Faccioli. Co-titolari: Università degli Studi di Perugia: 30%, Fondazione Telethon: 20%, Università degli Studi di Trento: 20%, INFN: 30%
3. **29/05/2020:** Patent application ITA N. 102020000012814, "Repurposing of 102020000012814 for diseases requiring the lowering of ACE2 expression". Autori: Astolfi A, Boldrin L, Massignan T, Terruzzi L, Pieri L. Titolare: Sibylla Biotech
4. **8/06/2020:** Patent application ITA N. 102020000013564, "Repurposing of Artefenomel for diseases requiring the lowering of ACE2 expression". Autori: Astolfi, Boldrin, Massignan, Terruzzi, Pieri. Titolare: Sibylla Biotech
5. **18/12/2020:** Patent application ITA N. 102020000031403, "Composti attivi su K-Ras". Autori: Astolfi, Boldrin, Massignan, Terruzzi, Pieri. Titolare: Sibylla Biotech
6. **21/05/2021:** Patent application ITA N 102021000013244, "Modulators of PrP and uses thereof". Autori: Barreca ML, Biasini E, Fallarino F, Manfroni G. Co-titolari: Università degli Studi di Perugia - 75%, Università degli Studi di Trento - 12,5%, Fondazione Telethon - 12,5%

B. ATTIVITÀ DI CONSULENZA

2017-presente: consulente per lo studio legale internazionale "Herbert Smith Freehills LLP" (<https://www.herbertsmithfreehills.com/>) su argomenti inerenti alla chimica farmaceutica e scoperta di farmaci (questa consulenza è riservata)

C. ATTIVITÀ CONTO TERZI

09/2020-08/2021: analisi banche dati di chimica per il committente Sibylla Biotech

06/2008: predizione della tossicità di composti per il committente Sterling (Solomeo di Corciano, PG)

D. ATTIVITÀ DI PUBLIC ENGAGEMENT

Divulgazione scientifica

27/4/2020: Intervista televisiva - TEF Channel Speciale Università "Sibylla Biotech & COVID-19"

7/4/2020: Intervista televisiva - TGR RAI Umbria "COVID-19: nuovi potenziali approcci terapeutici esplorati da Sibylla Biotech"

2019: Intervista televisiva - TEF Channel Speciale Università "Spin off Sibylla Biotech"

Iniziative di coinvolgimento dei cittadini nella ricerca

2021: Sharper (Open-lab) - "Giochiamo con modelli 3D di proteine e farmaci"

2019: Sharper (Open-lab) - "3-Dimensioniamoci con proteine e farmaci"

2018: Sharper (Open-lab) - "Immersione notturna in 3D nelle proteine"

Attività di coinvolgimento e interazione con il mondo della scuola

2016-presente: numerosi studenti ospitati nel I2D-lab nell'ambito dell'alternanza scuola-lavoro

ATTIVITA' DIDATTICA

A. MODULI/CORSI TENUTI E SEMINARI

- **Università di Messina**

A.A. 1999-2000 e 2000-2001: Esercitazioni pratiche per i corsi di “Analisi dei Farmaci I” e di “Analisi dei Medicinali” per il Corso di Laurea Specialistica in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche (CTF).

A.A. 2001-2002: Docente titolare dell’insegnamento “Metodologie avanzate in Chimica Farmaceutica”, Corso di Laurea Specialistica in CTF.

A.A. 2001-2002 e 2002-2003: Docente titolare dell’insegnamento “Biotecnologie Farmaceutiche”, Corso di Laurea Specialistica in CTF.

A.A. 2002-2003 e 2003-2004: Docente titolare dell’insegnamento “Chimica Tossicologica e Analisi Chimica Tossicologica”, Corso di Laurea in Tossicologia dell’Ambiente.

A.A. 2004-2005 e 2005-2006: Parti modulari degli insegnamenti di “Analisi dei Farmaci” e di “Chimica Farmaceutica I” per il Corso di Laurea Specialistica in CTF, e di “Analisi dei Medicinali II” per Corso di Laurea Specialistica in Farmacia.

A.A. 1999-2006: Compiti didattici aggiuntivi: cicli di lezioni e seminari su “Farmaci Chemioterapici” e “Molecular Modeling” per gli insegnamenti di “Chimica Farmaceutica I”, “Chimica Farmaceutica II” e “Chimica Farmaceutica III” (CdS in CTF). Ha inoltre tenuto lezioni ed esercitazioni su “Progettazione di Farmaci” e ricerca bibliografica on line per gli studenti del Corso di specializzazione in “Farmacia Ospedaliera”, e su “Biotecnologie Farmaceutiche” e “Ligand and Structure-based drug design” per gli studenti del Corso di dottorato in “Scienze Farmaceutiche”.

17-19/9/2003: Docente titolare dell’insegnamento “Fondamenti di Chimica per la gestione degli output in edilizia” all’interno del “Master per il Management Ambientale con specializzazione in edilizia sostenibile - EDILMAN”, presso il Dipartimento DASTEC, Facoltà di Architettura, Università degli studi di Reggio Calabria.

03/05/2002: Seminario “*Progettazione razionale di farmaci mediante tecniche di molecular modeling*” nell’ambito dell’attività didattico-seminariale del Corso di dottorato in “Scienze farmaceutiche” della Facoltà di Farmacia dell’Università degli Studi di Catania.

➤ Università di Perugia

A.A. 2020-2021-presente: Docente titolare dell’insegnamento “Progettazione Razionale dei Farmaci” (ex “Laboratorio di Modellistica Strutturale”) (CFU: 2 teorici + 4 pratici, 14 ore di lezioni teoriche + 48 ore di esercitazioni pratiche) per il Corso di Laurea Magistrale in Biotecnologie Farmaceutiche.

A.A. 2019-2020-presente: Docente titolare dell’insegnamento a scelta dello studente “Chimica Farmaceutica” (CFU: 6 teorici, 42 ore di lezioni teoriche) per il Corso di Laurea in Chimica

A.A. 2015-2016-presente: Docente titolare dell’insegnamento “Analisi dei Medicinali” (CFU: 3 teorici +3 pratici, 24 ore di lezioni teoriche e 45 ore di esercitazioni pratiche con 2/3 turni) per il Corso di Laurea Magistrale in CTF.

Da A.A. 2007-2008 a A.A. 2019-2020: Docente titolare dell’insegnamento “Laboratorio di Modellistica Strutturale” (CFU: 2 teorici + 4 pratici, 14 ore di lezioni teoriche e 48 ore di esercitazioni pratiche + 6 ore di didattica integrativa) per il Corso di Laurea Specialistica/Magistrale in Biotecnologie Farmaceutiche

19 e 21/1/2021: Seminario “La chimica computazionale nel settore farmaceutico” – Collegio di Merito della Fondazione ONAOSI, Perugia

18/3/2010: Seminario “Computational approaches to the discovery of new anti-HIV and anti-HCV agents” nell’ambito del Doctoral Training programme, Department of Chemistry – Division Biochemistry, Molecular and Structural Biology, Katholieke Universiteit Leuven, Leuven, Belgio.

B. ESITI DELLA VALUTAZIONE DA PARTE DEGLI STUDENTI DEI CORSI TENUTI (ULTIMI 5 ANNI – FONTE SISVALDIDAT)

Valutazione da parte degli studenti (x.x/10.0) dell’insegnamento di:

- “Laboratorio di Modellistica Strutturale”, I semestre, CdLM in Biotecnologie Farmaceutiche, UNIPG
- “Analisi dei Medicinali” – II semestre, CdLM in CTF, UNIPG
- “Chimica Farmaceutica” – II semestre, CdS in Chimica, UNIPG

confrontato con la media di tutti gli insegnamenti del corrispondente corso di laurea.

Descrizione domande	
D1	Le conoscenze preliminari possedute sono risultate sufficienti per la comprensione degli argomenti previsti nel programma di esame?
D2	Il carico di studio di questo insegnamento è proporzionato ai crediti assegnati?
D3	Il materiale didattico (indicato e disponibile) è adeguato per lo studio della materia?
D4	Le modalità di esame sono state definite in modo chiaro?
D5	Gli orari di svolgimento di lezioni, di esercitazioni e altre eventuali attività didattiche sono rispettati?
D6	Il docente stimola / motiva l'interesse verso la disciplina?
D7	Il docente espone gli argomenti in modo chiaro?
D8	Le attività didattiche integrative (esercitazioni, laboratori, seminari, ecc.) sono utili all'apprendimento della materia?
D9	L'insegnamento è stato svolto in maniera coerente con quanto dichiarato sul sito web del corso di studio?
D10	Il docente è reperibile per chiarimenti e spiegazioni?
D11	Le lezioni sono svolte dal/dai docente/ti titolare/ri? (solo per frequentanti)
D12	E'interessato/a agli argomenti trattati nell'insegnamento?
D13	Complessivamente, valuta in maniera positiva l'insegnamento?
D14	L'organizzazione del tirocinio nel suo complesso è risultata positiva? (domanda riferita al solo tirocinio)
D15	Le aule in cui si svolgono le lezioni sono adeguate? (si vede, si sente, si trova posto)

a.a. 2019/2020

	D1	D2	D3	D4	D5	D6	D7	D8	D9	D10	D11	D12	D13	D14	D15
CHIMICA FARMACEUTICA	6,83	7,67	8,08	7,92	9,27	8,73	8,64	-	7,50	8,83	8,64	8,91	9,45	-	-
CHIMICA Triennale	7,04	7,80	7,90	8,16	8,93	7,86	7,99	7,90	8,59	8,65	9,51	7,93	8,05	7,37	7,09
LABORATORIO DI MODELLISTICA STRUTTURALE	8,22	9,67	9,67	10,00	9,67	9,50	9,65	9,25	9,47	9,82	9,00	9,06	9,17	9,14	7,61
BIOTECNOLOGIE FARMACEUTICHE LM	8,27	8,29	8,58	9,19	9,28	8,88	8,86	9,11	9,17	9,25	9,53	9,01	8,90	8,92	6,29
ANALISI DEI MEDICINALI	8,59	7,88	9,47	9,16	7,91	8,44	9,22	-	8,44	9,47	9,06	9,31	8,69	-	-
CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE LMCU-5	7,75	7,59	7,88	8,30	8,90	7,96	8,03	8,02	8,66	8,91	9,52	8,21	8,11	7,45	6,77

a.a. 2018/2019

	D1	D2	D3	D4	D5	D6	D7	D8	D9	D10	D11	D12	D13	D14	D15
LABORATORIO DI MODELLISTICA STRUTTURALE	8,64	9,73	9,73	10,00	10,00	9,45	9,45	9,73	10,00	10,00	10,00	8,91	9,73	-	9,18
BIOTECNOLOGIE FARMACEUTICHE LM	8,18	8,50	8,71	9,37	9,31	9,01	8,96	8,80	9,44	9,32	9,63	8,75	8,85	8,77	8,08
ANALISI DEI MEDICINALI	8,78	7,05	9,69	9,74	9,74	8,90	9,17	9,56	9,59	9,51	10,00	9,33	9,33	9,12	6,11
CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE LMCU-5	7,72	7,44	7,78	8,53	9,00	7,80	7,95	8,04	8,68	8,84	9,54	8,17	8,03	7,56	6,84

a.a. 2017/2018

	D1	D2	D3	D4	D5	D6	D7	D8	D9	D10	D11	D12	D13	D14	D15
LABORATORIO DI MODELLISTICA STRUTTURALE	8,46	9,17	9,29	9,88	10,00	9,88	9,50	9,26	9,61	9,75	10,00	9,13	9,75	9,00	8,50
BIOTECNOLOGIE FARMACEUTICHE LM	7,74	8,28	8,41	9,52	9,67	8,98	8,79	8,95	9,32	9,56	9,79	8,75	8,93	8,66	8,00
ANALISI DEI MEDICINALI	8,58	6,71	9,46	9,62	9,50	8,71	8,99	9,22	9,42	9,16	9,81	9,06	9,21	8,48	7,90
CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE LMCU-5	7,71	7,46	7,67	8,65	8,96	7,79	7,78	7,94	8,63	8,77	9,58	8,30	8,00	7,77	7,29

a.a. 2016/2017

	D1	D2	D3	D4	D5	D6	D7	D8	D9	D10	D11	D12	D13	D14
LABORATORIO DI MODELLISTICA STRUTTURALE	8,80	9,80	9,60	10,00	10,00	10,00	10,00	9,40	9,79	10,00	10,00	9,60	10,00	-
BIOTECNOLOGIE FARMACEUTICHE LM	7,50	8,08	8,09	9,25	9,38	8,68	8,58	8,64	9,07	9,60	9,59	8,81	8,36	8,66
ANALISI DEI MEDICINALI	8,52	5,71	9,43	9,36	9,45	8,52	9,00	9,51	9,49	9,21	9,93	9,29	8,88	-
CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE LMCU-5	7,64	7,54	7,76	8,54	8,79	7,73	7,75	8,10	8,56	8,66	9,35	8,12	7,91	7,99

a.a. 2015/16

	D1	D2	D3	D4	D5	D6	D7	D8	D9	D10	D11	D12	D13	D14
LABORATORIO DI MODELLISTICA STRUTTURALE	7,25	8,83	8,83	9,33	9,08	9,08	8,83	9,00	8,83	8,83	9,33	8,58	8,58	-
BIOTECNOLOGIE FARMACEUTICHE LM	7,68	7,96	7,74	8,86	8,88	8,31	8,25	8,38	8,39	8,74	9,51	8,38	8,25	8,48
ANALISI DEI MEDICINALI	8,58	6,25	9,63	9,58	9,70	8,93	8,98	9,23	9,18	9,50	10,00	9,28	9,00	8,22
CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE LMCU-5	7,45	7,31	7,68	8,66	8,87	7,74	7,77	8,28	8,47	8,82	9,38	8,13	7,92	7,65

Valutazione da parte degli studenti (x.x/10.0) del corso di "Progettazione Razionale dei Farmaci (da A.A. 2020-2021, ex "Laboratorio di Modellistica Strutturale") – I semestre, CdLM in Biotecnologie Farmaceutiche, UNIPG

	Media	SQM	(2020/2021) BIOTECNOLOGIE FARMACEUTICHE
D1	8,69	1929	8,17
D2	8,59	2428	8,00
D3	9,52	1639	8,49
D4	9,52	1639	8,92
D5	9,52	1639	9,09
D6	9,21	1800	8,51
D7	9,41	1701	8,47
D8	9,61	1595	8,52
D9	9,41	1701	8,84
D10	9,52	1639	9,27
D11	9,52	1639	9,54
D12	9,21	1473	8,59
D13	9,35	1788	8,73
D14	9,08	2392	8,22
D15	8,92	1976	7,87
D16	8,41	2325	8,20

C. PARTECIPAZIONE ALLE COMMISSIONI ISTITUITE PER GLI ESAMI DI PROFITTO

2008-presente: Componente delle commissioni per gli esami di profitto dei seguenti insegnamenti (oltre agli insegnamenti di cui la Prof. Barreca è docente titolare):

- CdLM in Farmacia: Chimica farmaceutica e tossicologica II (2008-presente) e Analisi dei Medicinali II (2019-presente)
- CdLM in Biotecnologie Farmaceutiche: Metodologie chimiche e fermentative per la produzione di biofarmaci (2019-presente) e Biotecnologie Farmaceutiche (2010-2019)

1999-presente: Componente delle commissioni di laurea per i corsi di laurea specialistica/magistrale in Farmacia, CTF e Biotecnologie Farmaceutiche

D. ATTIVITÀ DI ORIENTAMENTO E DI TUTORAGGIO DEGLI STUDENTI

2021-presente: Tutor accademico di uno studente del CdS in Chimica (Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie – UNIPG) per lo svolgimento di uno stage aziendale

2017-presente: docente responsabile per i servizi di tutorato per il CdLM in CTF (DSF-UNIPG)

2016-presente: seminari di orientamento in ingresso per gli studenti degli ultimi anni delle scuole secondarie di II grado nell'ambito di iniziative del Dipartimento e/o dell'Ateneo. In particolare, gli ultimi seminari in presenza sono stati svolti nell'ambito del Progetto "POT-FARMACIA 2020-2021" presso le scuole "ITTS - Alessandro Volta" (27/11/2019) e "Liceo Scientifico - Galileo Galilei" (04/02/2020) di Perugia (titolo della presentazione: Computer-aided drug discovery), mentre in data 08/07/2021 la Prof. Barreca è intervenuta con una presentazione all'evento on-line "Magistralmente Unipg" per promuovere il CdLM in Biotecnologie farmaceutiche

2015-presente: docente responsabile per i servizi di tutorato per il CdLM in Biotecnologie Farmaceutiche (DSF-UNIPG)

E. INCARICHI DI INSEGNAMENTO E PARTECIPAZIONE AL COLLEGIO DEI DOCENTI, NELL'AMBITO DI DOTTORATI DI RICERCA ACCREDITATI DAL MINISTERO

2014-presente: Componente del Collegio Docenti del Dottorato Internazionale in "Scienze Farmaceutiche", Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Università di Perugia

2013-2016: Componente del Collegio Docenti del Dottorato di Ricerca in "Scienze Chimiche e Farmaceutiche", Università di Perugia

2010-2013: Componente del Collegio Docenti del Dottorato di Ricerca in "Chimica e Tecnologia del Farmaco a Profilo Internazionale e Nazionale", Università di Perugia

21, 23, 27 e 29/7/2015: Ciclo di lezioni teorico-pratiche su "Structure-based drug discovery" nell'ambito del Corso di Dottorato Internazionale in Scienze Farmaceutiche, Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Università di Perugia

F. PARTECIPAZIONE A COMMISSIONI DI VALUTAZIONE

06/2020: componente della Commissione giudicatrice della procedura di valutazione comparativa per la copertura di n.1 posto di ricercatore universitario a tempo determinato, ai sensi dell'art. 24, comma 3, lettera a) della legge 240/2010, per il SSD CHIM/08, presso il Dipartimento di Chimica e Farmacia dell'Università degli Studi di Sassari.

2010: Membro esterno della Commissione di dottorato in "Sciences, Biochemistry" presso il Department of Chemistry, Katholieke Universiteit Leuven, Belgio.

2003: Segretario nella Commissione giudicatrice della procedura di valutazione comparativa per la copertura di n.1 posto di ricercatore universitario per il SSD CHIM/08, presso la Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Palermo.

ELENCO COMPLETO DELLE PUBBLICAZIONI

*** Corresponding/co-corresponding author**

- (1) Spagnoli, G.; Massignan, T.; Astolfi, A.; Biggi, S.; Rigoli, M.; Brunelli, P.; Libergoli, M.; Ianeselli, A.; Orioli, S.; Boldrini, A.; Terruzzi, L.; Bonaldo, V.; Maietta, G.; Lorenzo, N. L.; Fernandez, L. C.; Codeseira, Y. B.; Tosatto, L.; Linsenmeier, L.; Vignoli, B.; Petris, G.; Gasparotto, D.; Pennuto, M.; Guella, G.; Canossa, M.; Altmeppen, H. C.; Lolli, G.; Biressi, S.; Pastor, M. M.; Requena, J. R.; Mancini, I.; **Barreca, M. L.***; Faccioli,

- P.; Biasini, E. Pharmacological Inactivation of the Prion Protein by Targeting a Folding Intermediate. *Commun. Biol.* **2021**, 4 (1). <https://doi.org/10.1038/s42003-020-01585-x>.
- (2) Pismataro, M. C.; Felicetti, T.; Bertagnin, C.; Nizi, M. G.; Bonomini, A.; **Barreca, M. L.**; Cecchetti, V.; Jochmans, D.; De Jonghe, S.; Neyts, J.; Tabarrini, O.; Massari, S. 1,2,4-Triazolo[1,5-a]Pyrimidines: Efficient One-Step Synthesis and Functionalization as Influenza Polymerase PA-PB1 Interaction Disruptors. *Eur. J. Med. Chem.* **2021**, 221. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2021.113494>.
- (3) Felicetti, T.; Burali, M. S.; Gwee, C. P.; Ki Chan, K. W.; Alonso, S.; Massari, S.; Sabatini, S.; Tabarrini, O.; **Barreca, M. L.**; Cecchetti, V.; Vasudevan, S. G.; Manfroni, G. Sustainable, Three-Component, One-Pot Procedure to Obtain Active Anti-Flavivirus Agents. *Eur. J. Med. Chem.* **2021**, 210. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2020.112992>.
- (4) Cedraro, N.; Cannalire, R.; Astolfi, A.; Mangiaterra, G.; Felicetti, T.; Vaiasicca, S.; Cernicchi, G.; Massari, S.; Manfroni, G.; Tabarrini, O.; Cecchetti, V.; **Barreca, M. L.**; Biavasco, F.; Sabatini, S. From Quinoline to Quinazoline-Based S. Aureus NorA Efflux Pump Inhibitors by Coupling a Focused Scaffold Hopping Approach and a Pharmacophore Search. *ChemMedChem* **2021**. <https://doi.org/10.1002/cmdc.202100282>.
- (5) Manfroni, G.; Ragonese, F.; Monarca, L.; Astolfi, A.; Mancinelli, L.; Iannitti, R. G.; Bastioli, F.; **Barreca, M. L.**; Cecchetti, V.; Fioretti, B. New Insights on KCa3.1 Channel Modulation. *Curr. Pharm. Des.* **2020**, 26 (18), 2096–2101. <https://doi.org/10.2174/1381612826666200316152645>.
- (6) Felicetti, T.; Mangiaterra, G.; Cannalire, R.; Cedraro, N.; Pietrella, D.; Astolfi, A.; Massari, S.; Tabarrini, O.; Manfroni, G.; **Barreca, M. L.**; Cecchetti, V.; Biavasco, F.; Sabatini, S. C-2 Phenyl Replacements to Obtain Potent Quinoline-Based Staphylococcus Aureus NorA Inhibitors. *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* **2020**, 35 (1), 584–597. <https://doi.org/10.1080/14756366.2020.1719083>.
- (7) Biggi, S.; Pancher, M.; Stincardini, C.; Luotti, S.; Massignan, T.; Dalle Vedove, A.; Astolfi, A.; Gatto, P.; Lolli, G.; **Barreca, M. L.**; Bonetto, V.; Adami, V.; Biasini, E. Identification of Compounds Inhibiting Prion Replication and Toxicity by Removing PrPC from the Cell Surface. *J. Neurochem.* **2020**, 152 (1), 136–150. <https://doi.org/10.1111/jnc.14805>.
- (8) Nizi, M. G.; Desantis, J.; Nakatani, Y.; Massari, S.; Mazzarella, M. A.; Shetye, G.; Sabatini, S.; **Barreca, M. L.**; Manfroni, G.; Felicetti, T.; Rushton-Green, R.; Hards, K.; Latacz, G.; Satała, G.; Bojarski, A. J.; Cecchetti, V.; Kolář, M. H.; Handzlik, J.; Cook, G. M.; Franzblau, S. G.; Tabarrini, O. Antitubercular Polyhalogenated Phenothiazines and Phenoselenazine with Reduced Binding to CNS Receptors. *Eur. J. Med. Chem.* **2020**, 201. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2020.112420>.
- (9) Cannalire, R.; Ki Chan, K. W.; Burali, M. S.; Gwee, C. P.; Wang, S.; Astolfi, A.; Massari, S.; Sabatini, S.; Tabarrini, O.; Mastrangelo, E.; **Barreca, M. L.**; Cecchetti, V.; Vasudevan, S. G.; Manfroni, G. Pyridobenzothiazolones Exert Potent Anti-Dengue Activity by Hampering Multiple Functions of NS5 Polymerase. *ACS Med. Chem. Lett.* **2020**, 11 (5), 773–782. <https://doi.org/10.1021/acsmchemlett.9b00619>.
- (10) Cannalire, R.; Mangiaterra, G.; Felicetti, T.; Astolfi, A.; Cedraro, N.; Massari, S.; Manfroni, G.; Tabarrini, O.; Vaiasicca, S.; **Barreca, M. L.**; Cecchetti, V.; Biavasco, F.; Sabatini, S. Structural Modifications of the Quinolin-4-Yloxy Core to Obtain New Staphylococcus Aureus NorA Inhibitors. *Int. J. Mol. Sci.* **2020**, 21 (19), 1–18. <https://doi.org/10.3390/ijms21197037>.
- (11) Astolfi, A.; Spagnolli, G.; Biasini, E.; **Barreca, M. L.*** The Compelling Demand for an Effective PrPC-Directed Therapy against Prion Diseases. *ACS Med. Chem. Lett.* **2020**, 11 (11), 2063–2067. <https://doi.org/10.1021/acsmchemlett.0c00528>.
- (12) Bartolini, D.; Bührmann, M.; **Barreca, M. L.**; Manfroni, G.; Cecchetti, V.; Rauh, D.; Galli, F. Co-Crystal Structure Determination and Cellular Evaluation of 1,4-Dihydropyrazolo[4,3-c] [1,2] Benzothiazine 5,5-Dioxide P38 α MAPK Inhibitors. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **2019**, 511 (3), 579–586. <https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2019.02.063>.
- (13) Cannalire, R.; Tarantino, D.; Piorkowski, G.; Carletti, T.; Massari, S.; Felicetti, T.; **Barreca, M. L.**; Sabatini, S.; Tabarrini, O.; Marcello, A.; Milani, M.; Cecchetti, V.; Mastrangelo, E.; Manfroni, G.; Querat, G. Broad Spectrum Anti-Flavivirus Pyridobenzothiazolones Leading to Less Infective Virions. *Antiviral Res.* **2019**, 167, 6–12. <https://doi.org/10.1016/j.antiviral.2019.03.004>.
- (14) Felicetti, T.; Machado, D.; Cannalire, R.; Astolfi, A.; Massari, S.; Tabarrini, O.; Manfroni, G.; **Barreca, M. L.**; Cecchetti, V.; Viveiros, M.; Sabatini, S. Modifications on C6 and C7 Positions of 3-Phenylquinolone Efflux Pump Inhibitors Led to Potent and Safe Antimycobacterial Treatment Adjuvants. *ACS Infect. Dis.* **2019**, 5 (6), 982–1000. <https://doi.org/10.1021/acsinfecdis.9b00041>.
- (15) Palazzotti, D.; Bissaro, M.; Bolcato, G.; Astolfi, A.; Felicetti, T.; Sabatini, S.; Sturlese, M.; Cecchetti, V.; **Barreca, M. L.***; Moro, S. Deciphering the Molecular Recognition Mechanism of Multidrug Resistance Staphylococcus Aureus Nora Efflux Pump Using a Supervised Molecular Dynamics Approach. *Int. J. Mol. Sci.* **2019**, 20 (16). <https://doi.org/10.3390/ijms20164041>.
- (16) Astolfi, A.; Kudolo, M.; Brea, J.; Manni, G.; Manfroni, G.; Palazzotti, D.; Sabatini, S.; Cecchetti, F.; Felicetti, T.; Cannalire, R.; Massari, S.; Tabarrini, O.; Loza, M. I.; Fallarino, F.; Cecchetti, V.; Laufer, S. A.; **Barreca, M. L.*** Discovery of Potent P38 α MAPK Inhibitors through a Funnel like Workflow Combining in Silico Screening and in Vitro Validation. *Eur. J. Med. Chem.* **2019**, 182.

- <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2019.111624>.
- (17) Acchioni, C.; Remoli, A. L.; Marsili, G.; Acchioni, M.; Nardolillo, I.; Orsatti, R.; Farcomeni, S.; Palermo, E.; Perrotti, E.; **Barreca, M. L.**; Sabatini, S.; Sandini, S.; Parolin, C.; Lin, R.; Borsetti, A.; Hiscott, J.; Sgarbanti, M. Alternate NF-KB-Independent Signaling Reactivation of Latent HIV-1 Provirus. *J. Virol.* **2019**, *93* (18). <https://doi.org/10.1128/jvi.00495-19>.
- (18) Cannalire, R.; Tarantino, D.; Astolfi, A.; **Barreca, M. L.**; Sabatini, S.; Massari, S.; Tabarrini, O.; Milani, M.; Querat, G.; Mastrangelo, E.; Manfroni, G.; Cecchetti, V. Functionalized 2,1-Benzothiazine 2,2-Dioxides as New Inhibitors of Dengue NS5 RNA-Dependent RNA Polymerase. *Eur. J. Med. Chem.* **2018**, *143*, 1667–1676. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2017.10.064>.
- (19) Felicetti, T.; Cannalire, R.; Pietrella, D.; Latacz, G.; Lubelska, A.; Manfroni, G.; **Barreca, M. L.**; Massari, S.; Tabarrini, O.; Kieć-Kononowicz, K.; Schindler, B. D.; Kaatz, G. W.; Cecchetti, V.; Sabatini, S. 2-Phenylquinoline S. Aureus NorA Efflux Pump Inhibitors: Evaluation of the Importance of Methoxy Group Introduction. *J. Med. Chem.* **2018**, *61* (17), 7827–7848. <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.8b00791>.
- (20) Felicetti, T.; Cannalire, R.; Nizi, M. G.; Tabarrini, O.; Massari, S.; **Barreca, M. L.**; Manfroni, G.; Schindler, B. D.; Cecchetti, V.; Kaatz, G. W.; Sabatini, S. Studies on 2-Phenylquinoline Staphylococcus Aureus NorA Efflux Pump Inhibitors: New Insights on the C-6 Position. *Eur. J. Med. Chem.* **2018**, *155*, 428–433. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2018.06.013>.
- (21) **Barreca, M. L.***; Iraci, N.; Biggi, S.; Cecchetti, V.; Biasini, E. Pharmacological Agents Targeting the Cellular Prion Protein. *Pathogens* **2018**, *7* (1). <https://doi.org/10.3390/pathogens7010027>.
- (22) Astolfi, A.; Manfroni, G.; Cecchetti, V.; **Barreca, M. L.*** A Comprehensive Structural Overview of P38 α Mitogen-Activated Protein Kinase in Complex with ATP-Site and Non-ATP-Site Binders. *ChemMedChem* **2018**, *13* (1), 7–14. <https://doi.org/10.1002/cmdc.201700636>.
- (23) Madia, V. N.; Benedetti, R.; **Barreca, M. L.**; Ngo, L.; Pescatori, L.; Messori, A.; Pupo, G.; Saccoliti, F.; Valente, S.; Mai, A.; Scipione, L.; Zheng, Y. G.; Tintori, C.; Botta, M.; Cecchetti, V.; Altucci, L.; Di Santo, R.; Costi, R. Structure–Activity Relationships on Cinnamoyl Derivatives as Inhibitors of P300 Histone Acetyltransferase. *ChemMedChem* **2017**, *12* (16), 1359–1368. <https://doi.org/10.1002/cmdc.201700040>.
- (24) Felicetti, T.; Cannalire, R.; Burali, M. S.; Massari, S.; Manfroni, G.; **Barreca, M. L.**; Tabarrini, O.; Schindler, B. D.; Sabatini, S.; Kaatz, G. W.; Cecchetti, V. Searching for Novel Inhibitors of the S. Aureus NorA Efflux Pump: Synthesis and Biological Evaluation of the 3-Phenyl-1,4-Benzothiazine Analogues. *ChemMedChem* **2017**, *12* (16), 1293–1302. <https://doi.org/10.1002/cmdc.201700286>.
- (25) Desantis, J.; Nannetti, G.; Massari, S.; **Barreca, M. L.**; Manfroni, G.; Cecchetti, V.; Palù, G.; Goracci, L.; Loregian, A.; Tabarrini, O. Exploring the Cycloheptathiophene-3-Carboxamide Scaffold to Disrupt the Interactions of the Influenza Polymerase Subunits and Obtain Potent Anti-Influenza Activity. *Eur. J. Med. Chem.* **2017**, *138*, 128–139. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2017.06.015>.
- (26) Cannalire, R.; Machado, D.; Felicetti, T.; Santos Costa, S.; Massari, S.; Manfroni, G.; **Barreca, M. L.**; Tabarrini, O.; Couto, I.; Viveiros, M.; Sabatini, S.; Cecchetti, V. Natural Isoflavone Biochanin A as a Template for the Design of New and Potent 3-Phenylquinolone Efflux Inhibitors against Mycobacterium Avium. *Eur. J. Med. Chem.* **2017**, *140*, 321–330. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2017.09.014>.
- (27) Astolfi, A.; Felicetti, T.; Iraci, N.; Manfroni, G.; Massari, S.; Pietrella, D.; Tabarrini, O.; Kaatz, G. W.; **Barreca, M. L.***; Sabatini, S.; Cecchetti, V. Pharmacophore-Based Repositioning of Approved Drugs as Novel Staphylococcus Aureus NorA Efflux Pump Inhibitors. *J. Med. Chem.* **2017**, *60* (4), 1598–1604. <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.6b01439>.
- (28) Massignan, T.; Sangiovanni, V.; Biggi, S.; Stincardini, C.; Elezgarai, S. R.; Maietta, G.; Andreev, I. A.; Ratmanova, N. K.; Belov, D. S.; Lukyanenko, E. R.; Belov, G. M.; **Barreca, M. L.**; Altieri, A.; Kurkin, A. V.; Biasini, E. A Small-Molecule Inhibitor of Prion Replication and Mutant Prion Protein Toxicity. *ChemMedChem* **2017**, *12* (16), 1286–1292. <https://doi.org/10.1002/cmdc.201700302>.
- (29) **Barreca, M. L.*** Maria Letizia Barreca on Hepatitis C Virus Treatment and Control. *Future Med. Chem.* **2016**, *8* (1), 7–9. <https://doi.org/10.4155/fmc.15.170>.
- (30) Cannalire, R.; **Barreca, M. L.**; Manfroni, G.; Cecchetti, V. A Journey around the Medicinal Chemistry of Hepatitis C Virus Inhibitors Targeting NS4B: From Target to Preclinical Drug Candidates. *J. Med. Chem.* **2016**, *59* (1), 16–41. <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.5b00825>.
- (31) Kaushik-Basu, N.; Ratmanova, N. K.; Manvar, D.; Belov, D. S.; Cevik, O.; Basu, A.; Yerukhimovich, M. M.; Lukyanenko, E. R.; Andreev, I. A.; Belov, G. M.; Manfroni, G.; Cecchetti, V.; Frick, D. N.; Kurkin, A. V.; Altieri, A.; **Barreca, M. L.*** Bicyclic Octahydrocyclohepta[b]Pyrrol-4(1H)One Derivatives as Novel Selective Anti-Hepatitis C Virus Agents. *Eur. J. Med. Chem.* **2016**, *122*, 319–325. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2016.06.041>.
- (32) Tarantino, D.; Cannalire, R.; Mastrangelo, E.; Croci, R.; Querat, G.; **Barreca, M. L.**; Bolognesi, M.; Manfroni, G.; Cecchetti, V.; Milani, M. Targeting Flavivirus RNA Dependent RNA Polymerase through a Pyridobenzothiazole Inhibitor. *Antiviral Res.* **2016**, *134*, 226–235. <https://doi.org/10.1016/j.antiviral.2016.09.007>.
- (33) Iraci, N.; Stincardini, C.; **Barreca, M. L.**; Biasini, E. Decoding the Function of the N-Terminal Tail of the

- Cellular Prion Protein to Inspire Novel Therapeutic Avenues for Neurodegenerative Diseases. *Virus Res.* **2015**, *207*, 62–68. <https://doi.org/10.1016/j.virusres.2014.10.015>.
- (34) Sabatini, S.; Manfroni, G.; **Barreca, M. L.***; Bauer, S. M.; Gargaro, M.; Cannalire, R.; Astolfi, A.; Brea, J.; Vacca, C.; Pirro, M.; Massari, S.; Tabarrini, O.; Loza, M. I.; Fallarino, F.; Laufer, S. A.; Cecchetti, V. The Pyrazolobenzothiazine Core as a New Chemotype of P38 Alpha Mitogen-Activated Protein Kinase Inhibitors. *Chem. Biol. Drug Des.* **2015**, *86* (4), 531–545. <https://doi.org/10.1111/cbdd.12516>.
- (35) Astolfi, A.; Iraci, N.; Manfroni, G.; **Barreca, M. L.***; Cecchetti, V. A Comprehensive Structural Overview of P38 α MAPK in Complex with Type I Inhibitors. *ChemMedChem* **2015**, *10* (6), 957–969. <https://doi.org/10.1002/cmdc.201500030>.
- (36) Franci, G.; Manfroni, G.; Cannalire, R.; Felicetti, T.; Tabarrini, O.; Salvato, A.; **Barreca, M. L.**; Altucci, L.; Cecchetti, V. Tumour Cell Population Growth Inhibition and Cell Death Induction of Functionalized 6-Aminoquinolone Derivatives. *Cell Prolif.* **2015**, *48* (6), 705–717. <https://doi.org/10.1111/cpr.12224>.
- (37) Astolfi, A.; Iraci, N.; Sabatini, S.; **Barreca, M. L.**; Cecchetti, V. P38 α MAPK and Type I Inhibitors: Binding Site Analysis and Use of Target Ensembles in Virtual Screening. *Molecules* **2015**, *20* (9), 15842–15861. <https://doi.org/10.3390/molecules200915842>.
- (38) Andreev, I. A.; Manvar, D.; **Barreca, M. L.***; Belov, D. S.; Basu, A.; Sweeney, N. L.; Ratmanova, N. K.; Lukyanenko, E. R.; Manfroni, G.; Cecchetti, V.; Frick, D. N.; Altieri, A.; Kaushik-Basu, N.; Kurkin, A. V. Discovery of the 2-Phenyl-4,5,6,7-Tetrahydro-1 H -Indole as a Novel Anti-Hepatitis C Virus Targeting Scaffold. *Eur. J. Med. Chem.* **2015**, *96*, 250–258. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2015.04.022>.
- (39) **Barreca, M. L.***; Iraci, N.; Manfroni, G.; Gaetani, R.; Guercini, C.; Sabatini, S.; Tabarrini, O.; Cecchetti, V. Accounting for Target Flexibility and Water Molecules by Docking to Ensembles of Target Structures: The HCV NS5B Palm Site i Inhibitors Case Study. *J. Chem. Inf. Model.* **2014**, *54* (2), 481–497. <https://doi.org/10.1021/ci400367m>.
- (40) Manfroni, G.; Cannalire, R.; **Barreca, M. L.***; Kaushik-Basu, N.; Leyssen, P.; Winkvist, J.; Iraci, N.; Manvar, D.; Paeshuyse, J.; Guhamazumder, R.; Basu, A.; Sabatini, S.; Tabarrini, O.; Danielson, U. H.; Neyts, J.; Cecchetti, V. The Versatile Nature of the 6-Aminoquinolone Scaffold: Identification of Submicromolar Hepatitis C Virus NS5B Inhibitors. *J. Med. Chem.* **2014**, *57* (5), 1952–1963. <https://doi.org/10.1021/jm401362f>.
- (41) Manfroni, G.; Manvar, D.; **Barreca, M. L.***; Kaushik-Basu, N.; Leyssen, P.; Paeshuyse, J.; Cannalire, R.; Iraci, N.; Basu, A.; Chudae, M.; Zamperini, C.; Dreassi, E.; Sabatini, S.; Tabarrini, O.; Neyts, J.; Cecchetti, V. New Pyrazolobenzothiazine Derivatives as Hepatitis C Virus NS5B Polymerase Palm Site i Inhibitors. *J. Med. Chem.* **2014**, *57* (8), 3247–3262. <https://doi.org/10.1021/jm401688h>.
- (42) Sancineto, L.; Iraci, N.; **Barreca, M. L.**; Massari, S.; Manfroni, G.; Corazza, G.; Cecchetti, V.; Marcello, A.; Daelemans, D.; Pannecouque, C.; Tabarrini, O. Exploiting the Anti-HIV 6-Desfluoroquinolones to Design Multiple Ligands. *Bioorganic Med. Chem.* **2014**, *22* (17), 4658–4666. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2014.07.018>.
- (43) Sancineto, L.; Iraci, N.; Massari, S.; Attanasio, V.; Corazza, G.; **Barreca, M. L.**; Sabatini, S.; Manfroni, G.; Avanzi, N. R.; Cecchetti, V.; Pannecouque, C.; Marcello, A.; Tabarrini, O. Computer-Aided Design, Synthesis and Validation of 2-Phenylquinazolinone Fragments as CDK9 Inhibitors with Anti-HIV-1 Tat-Mediated Transcription Activity. *ChemMedChem* **2013**, *8* (12), 1941–1953. <https://doi.org/10.1002/cmdc.201300287>.
- (44) Martelli, A.; Manfroni, G.; Sabbatini, P.; **Barreca, M. L.**; Testai, L.; Novelli, M.; Sabatini, S.; Massari, S.; Tabarrini, O.; Masiello, P.; Calderone, V.; Cecchetti, V. 1,4-Benzothiazine ATP-Sensitive Potassium Channel Openers: Modifications at the C-2 and C-6 Positions. *J. Med. Chem.* **2013**, *56* (11), 4718–4728. <https://doi.org/10.1021/jm400435a>.
- (45) Sabatini, S.; Gosetto, F.; Iraci, N.; **Barreca, M. L.**; Massari, S.; Sancineto, L.; Manfroni, G.; Tabarrini, O.; Dimovska, M.; Kaatz, G. W.; Cecchetti, V. Re-Evolution of the 2-Phenylquinolines: Ligand-Based Design, Synthesis, and Biological Evaluation of a Potent New Class of Staphylococcus Aureus NorA Efflux Pump Inhibitors to Combat Antimicrobial Resistance. *J. Med. Chem.* **2013**, *56* (12), 4975–4989. <https://doi.org/10.1021/jm400262a>.
- (46) **Barreca, M. L.***; Manfroni, G.; Leyssen, P.; Winkvist, J.; Kaushik-Basu, N.; Paeshuyse, J.; Krishnan, R.; Iraci, N.; Sabatini, S.; Tabarrini, O.; Basu, A.; Danielson, U. H.; Neyts, J.; Cecchetti, V. Structure-Based Discovery of Pyrazolobenzothiazine Derivatives as Inhibitors of Hepatitis C Virus Replication. *J. Med. Chem.* **2013**, *56* (6), 2270–2282. <https://doi.org/10.1021/jm301643a>.
- (47) Manfroni, G.; Meschini, F.; **Barreca, M. L.***; Leyssen, P.; Samuele, A.; Iraci, N.; Sabatini, S.; Massari, S.; Maga, G.; Neyts, J.; Cecchetti, V. Pyridobenzothiazole Derivatives as New Chemotype Targeting the HCV NS5B Polymerase. *Bioorganic Med. Chem.* **2012**, *20* (2), 866–876. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2011.11.061>.
- (48) Shytaj, I. L.; Norelli, S.; Chirullo, B.; Della Corte, A.; Collins, M.; Yalley-Ogunro, J.; Greenhouse, J.; Iraci, N.; Acosta, E. P.; **Barreca, M. L.**; Lewis, M. G.; Savarino, A. A Highly Intensified ART Regimen Induces Long-Term Viral Suppression and Restriction of the Viral Reservoir in a Simian AIDS Model. *PLoS Pathog.* **2012**,

- 8 (6). <https://doi.org/10.1371/journal.ppat.1002774>.
- (49) **Barreca, M. L.***; Iraci, N.; Manfroni, G.; Cecchetti, V. Allosteric Inhibition of the Hepatitis C Virus NS5B Polymerase: In Silico Strategies for Drug Discovery and Development. *Future Med. Chem.* **2011**, 3 (8), 1027–1055. <https://doi.org/10.4155/fmc.11.53>.
- (50) Bajorath, J.; **Barreca, M. L.**; Bender, A.; Bryce, R.; Hutter, M.; Laggner, C.; Laughton, C.; Martin, Y.; Mitchell, J.; Padova, A.; Renner, S.; Selzer, P. M.; Sherman, W.; Sippl, W.; Taft, C.; Tuccinardi, T.; Vistoli, G.; Willett, P. Ask the Experts: Focus on Computational Chemistry. *Future Med. Chem.* **2011**, 3 (8), 909–921. <https://doi.org/10.4155/fmc.11.57>.
- (51) Massari, S.; Daelemans, D.; **Barreca, M. L.**; Knezevich, A.; Sabatini, S.; Cecchetti, V.; Marcello, A.; Pannecouque, C.; Tabarrini, O. A 1,8-Naphthyridone Derivative Targets the HIV-1 Tat-Mediated Transcription and Potently Inhibits the HIV-1 Replication. *J. Med. Chem.* **2010**, 53 (2), 641–648. <https://doi.org/10.1021/jm901211d>.
- (52) Ferro, S.; De Luca, L.; **Barreca, M. L.**; Grazia, S. De; Christ, F.; Debyser, Z.; Chimirri, A. New Chloro,Fluorobenzylindole Derivatives as Integrase Strand-Transfer Inhibitors (INSTIs) and Their Mode of Action. *Bioorganic Med. Chem.* **2010**, 18 (15), 5510–5518. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2010.06.063>.
- (53) De Luca, L.; Ferro, S.; Gitto, R.; **Barreca, M. L.**; Agnello, S.; Christ, F.; Debyser, Z.; Chimirri, A. Small Molecules Targeting the Interaction between HIV-1 Integrase and LEDGF/P75 Cofactor. *Bioorganic Med. Chem.* **2010**, 18 (21), 7515–7521. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2010.08.051>.
- (54) Lewis, M. G.; Norelli, S.; Collins, M.; **Barreca, M. L.**; Iraci, N.; Chirullo, B.; Yalley-Ogunro, J.; Greenhouse, J.; Titti, F.; Garaci, E.; Savarino, A. Response of a Simian Immunodeficiency Virus (SIVmac251) to Raltegravir: A Basis for a New Treatment for Simian AIDS and an Animal Model for Studying Lentiviral Persistence during Antiretroviral Therapy. *Retrovirology* **2010**, 7. <https://doi.org/10.1186/1742-4690-7-21>.
- (55) Ferro, S.; De Grazia, S.; De Luca, L.; **Barreca, M. L.**; Debyser, Z.; Chimirri, A. Structural Modification of Diketo Acid Portion in 1H-Benzylindole Derivatives HIV-1 Integrase Inhibitors. *Heterocycles* **2009**, 78 (4), 947–959. <https://doi.org/10.3987/COM-08-11573>.
- (56) Ferro, S.; De Luca, L.; **Barreca, M. L.**; Iraci, N.; De Grazia, S.; Christ, F.; Witvrouw, M.; Debyser, Z.; Chimirri, A. Docking Studies on a New Human Immunodeficiency Virus Integrase-Mg-DNA Complex: Phenyl Ring Exploration and Synthesis of 1H-Benzylindole Derivatives through Fluorine Substitutions. *J. Med. Chem.* **2009**, 52 (2), 569–573. <https://doi.org/10.1021/jm8009266>.
- (57) De Luca, L.; **Barreca, M. L.***; Ferro, S.; Christ, F.; Iraci, N.; Gitto, R.; Monforte, A. M.; Debyser, Z.; Chimirri, A. Pharmacophore-Based Discovery of Small-Molecule Inhibitors of Protein-Protein Interactions between HIV-1 Integrase and Cellular Cofactor LEDGF/P75. *ChemMedChem* **2009**, 4 (8), 1311–1316. <https://doi.org/10.1002/cmdc.200900070>.
- (58) **Barreca, M. L.***; Iraci, N.; De Luca, L.; Chimirri, A. Induced-Fit Docking Approach Provides Insight into the Binding Mode and Mechanism of Action of HIV-1 Integrase Inhibitors. *ChemMedChem* **2009**, 4 (9), 1446–1456. <https://doi.org/10.1002/cmdc.200900166>.
- (59) Ferro, S.; Agnello, S.; **Barreca, M. L.**; De Luca, L.; Christ, F.; Gitto, R. Synthesis of New Pyridazine Derivatives as Potential Anti-HIV-1 Agents. *J. Heterocycl. Chem.* **2009**, 46 (6), 1420–1424. <https://doi.org/10.1002/jhet.230>.
- (60) De Luca, L.; **Barreca, M. L.**; Ferro, S.; Iraci, N.; Michiels, M.; Christ, F.; Debyser, Z.; Witvrouw, M.; Chimirri, A. A Refined Pharmacophore Model for HIV-1 Integrase Inhibitors: Optimization of Potency in the 1H-Benzylindole Series. *Bioorganic Med. Chem. Lett.* **2008**, 18 (9), 2891–2895. <https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2008.03.089>.
- (61) Hombrouck, A.; Van Remoortel, B.; Michiels, M.; Noppe, W.; Christ, F.; Eneroth, A.; Sahlberg, B. L.; Benkestock, K.; Vrang, L.; Johansson, N. G.; **Barreca, M. L.**; De Luca, L.; Ferro, S.; Chimirri, A.; Debyser, Z.; Witvrouw, M. Preclinical Evaluation of 1H-Benzylindole Derivatives as Novel Human Immunodeficiency Virus Integrase Strand Transfer Inhibitors. *Antimicrob. Agents Chemother.* **2008**, 52 (8), 2861–2869. <https://doi.org/10.1128/AAC.00210-08>.
- (62) Monforte, A. M.; Rao, A.; Logoteta, P.; Ferro, S.; De Luca, L.; **Barreca, M. L.**; Iraci, N.; Maga, G.; De Clercq, E.; Pannecouque, C.; Chimirri, A. Novel N1-Substituted 1,3-Dihydro-2H-Benzimidazol-2-Ones as Potent Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors. *Bioorganic Med. Chem.* **2008**, 16 (15), 7429–7435. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2008.06.012>.
- (63) Billamboz, M.; Bailly, F.; **Barreca, M. L.**; De Luca, L.; Mouscadet, J. F.; Calmels, C.; Andréola, M. L.; Witvrouw, M.; Christ, F.; Debyser, Z.; Cotelle, P. Design, Synthesis, and Biological Evaluation of a Series of 2-Hydroxyisoquinoline-1,3(2H,4H)-Diones as Dual Inhibitors of Human Immunodeficiency Virus Type 1 Integrase and the Reverse Transcriptase RNase H Domain. *J. Med. Chem.* **2008**, 51 (24), 7717–7730. <https://doi.org/10.1021/jm8007085>.
- (64) Norelli, S.; Daker, S.; D’Ostilio, D.; Mele, F.; Mancini, F.; Taglia, F.; Ruggieri, A.; Ciccozzi, M.; Cauda, R.; Ciervo, A.; **Barreca, M. L.**; Pistello, M.; Bendinelli, M.; Savarino, A. Response of Feline Immunodeficiency Virus (FIV) to Tipranavir May Provide New Clues for Development of Broad-Based Inhibitors of Retroviral Proteases Acting on Drug-Resistant HIV-1. *Curr. HIV Res.* **2008**, 6 (4), 306–317. <https://doi.org/10.2174/157016208785132527>.

- (65) **Barreca, M. L.***; De Luca, L.; Iraci, N.; Rao, A.; Ferro, S.; Maga, G.; Chimirri, A. Structure-Based Pharmacophore Identification of New Chemical Scaffolds as Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors. *J. Chem. Inf. Model.* **2007**, 47 (2), 557–562. <https://doi.org/10.1021/ci600320q>.
- (66) Ferro, S.; **Barreca, M. L.***; De Luca, L.; Rao, A.; Monforte, A. M.; Debyser, Z.; Witvrouw, M.; Chimirri, A. New 4-[(1-Benzyl-1H-Indol-3-Yl)Carbonyl]-3-Hydroxyfuran-2(5H)-Ones, β -Diketo Acid Analogs as HIV-1 Integrase Inhibitors. *Arch. Pharm. (Weinheim)*. **2007**, 340 (6), 292–298. <https://doi.org/10.1002/ardp.200700066>.
- (67) Gitto, R.; Ficarra, R.; Stancanelli, R.; Guardo, M.; De Luca, L.; **Barreca, M. L.**; Pagano, B.; Rotondo, A.; Bruno, G.; Russo, E.; De Sarro, G.; Chimirri, A. Synthesis, Resolution, Stereochemistry, and Molecular Modeling of (R)- and (S)-2-Acetyl-1-(4'-Chlorophenyl)-6,7-Dimethoxy-1,2,3,4-Tetrahydroisoquinoline AMPAR Antagonists. *Bioorganic Med. Chem.* **2007**, 15 (16), 5417–5423. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2007.05.059>.
- (68) Savarino, A.; Pistello, M.; D'Ostilio, D.; Zabogli, E.; Taglia, F.; Mancini, F.; Ferro, S.; Matteucci, D.; De Luca, L.; **Barreca, M. L.**; Ciervo, A.; Chimirri, A.; Ciccozzi, M.; Bendinelli, M. Human Immunodeficiency Virus Integrase Inhibitors Efficiently Suppress Feline Immunodeficiency Virus Replication in Vitro and Provide a Rationale to Redesign Antiretroviral Treatment for Feline AIDS. *Retrovirology* **2007**, 4. <https://doi.org/10.1186/1742-4690-4-79>.
- (69) **Barreca, M. L.***; Ortuso, F.; Iraci, N.; De Luca, L.; Alcaro, S.; Chimirri, A. Tn5 Transposase as a Useful Platform to Simulate HIV-1 Integrase Inhibitor Binding Mode. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **2007**, 363 (3), 554–560. <https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2007.08.199>.
- (70) **Barreca, M. L.***; Rao, A.; Luca, L. De; Iraci, N.; Monforte, A. M.; Maga, G.; Clercq, E. De; Pannecouque, C.; Balzarini, J.; Chimirri, A. Discovery of Novel Benzimidazolones as Potent Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors Active against Wild-Type and Mutant HIV-1 Strains. *Bioorganic Med. Chem. Lett.* **2007**, 17 (7), 1956–1960. <https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2007.01.025>.
- (71) **Barreca, M. L.**; De Luca, L.; Ferro, S.; Rao, A.; Monforte, A. M.; Chimirri, A. Computational and Synthetic Approaches for the Discovery of HIV-1 Integrase Inhibitors. *Arkivoc* **2006**, 2006 (7), 224–244. <https://doi.org/10.3998/ark.5550190.0007.717>.
- (72) **Barreca, M. L.***; De Luca, L.; Iraci, N.; Chimirri, A. Binding Mode Prediction of Strand Transfer HIV-1 Integrase Inhibitors Using Tn5 Transposase as a Plausible Surrogate Model for HIV-1 Integrase. *J. Med. Chem.* **2006**, 49 (13), 3994–3997. <https://doi.org/10.1021/jm060323r>.
- (73) De Luca, L.; Gitto, R.; **Barreca, M. L.**; Caruso, R.; Quartarone, S.; Citraro, R.; De Sarro, G.; Chimirri, A. 3D Pharmacophore Models for 1,2,3,4-Tetrahydroisoquinoline Derivatives Acting as Anticonvulsant Agents. *Arch. Pharm. (Weinheim)*. **2006**, 339 (7), 388–400. <https://doi.org/10.1002/ardp.200600022>.
- (74) Sarro, G.; Gitto, R.; Russo, E.; Ibbadu, G.; **Barreca, M. L.**; Luca, L.; Chimirri, A. AMPA Receptor Antagonists as Potential Anticonvulsant Drugs. *Curr. Top. Med. Chem.* **2005**, 5 (1), 31–42. <https://doi.org/10.2174/1568026053386999>.
- (75) Ottanà, R.; MacCari, R.; **Barreca, M. L.**; Bruno, G.; Rotondo, A.; Rossi, A.; Chiricosta, G.; Di Paola, R.; Sautebin, L.; Cuzzocrea, S.; Vigorita, M. G. 5-Arylidene-2-Imino-4-Thiazolidinones: Design and Synthesis of Novel Anti-Inflammatory Agents. *Bioorganic Med. Chem.* **2005**, 13 (13), 4243–4252. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2005.04.058>.
- (76) De Luca, L.; Vistoli, G.; Pedretti, A.; **Barreca, M. L.**; Chimirri, A. Molecular Dynamics Studies of the Full-Length Integrase-DNA Complex. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **2005**, 336 (4), 1010–1016. <https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2005.08.211>.
- (77) **Barreca, M. L.***; Ferro, S.; Rao, A.; De Luca, L.; Zappalà, M.; Monforte, A. M.; Debyser, Z.; Witvrouw, M.; Chimirri, A. Pharmacophore-Based Design of HIV-1 Integrase Strand-Transfer Inhibitors. *J. Med. Chem.* **2005**, 48 (22), 7084–7088. <https://doi.org/10.1021/jm050549e>.
- (78) **Barreca, M. L.***; Rao, A.; De Luca, L.; Zappalà, M.; Monforte, A. M.; Maga, G.; Pannecouque, C.; Balzarini, J.; De Clercq, E.; Chimirri, A.; Monforte, P. Computational Strategies in Discovering Novel Non-Nucleoside Inhibitors of HIV-1 RT. *J. Med. Chem.* **2005**, 48 (9), 3433–3437. <https://doi.org/10.1021/jm049279a>.
- (79) Gitto, R.; Caruso, R.; Orlando, V.; Quartarone, S.; **Barreca, M. L.**; Ferreri, G.; Russo, E.; De Sarro, G.; Chimirri, A. Synthesis and Anticonvulsant Properties of Tetrahydroisoquinoline Derivatives. *Farmacologia* **2004**, 59 (1), 7–12. <https://doi.org/10.1016/j.farmac.2003.10.003>.
- (80) Chimirri, A.; De Sarro, G.; Quartarone, S.; **Barreca, M. L.**; Caruso, R.; De Luca, L.; Gitto, R. Search for Noncompetitive 2-Amino-3-(3-Hydroxy-5-Methyl-4-Isoxazolyl) Propionic Acid Receptor (AMPA) Antagonists: Synthesis, Pharmacological Properties, and Computational Studies. *Pure Appl. Chem.* **2004**, 76 (5), 931–939. <https://doi.org/10.1351/pac200476050931>.
- (81) Gitto, R.; **Barreca, M. L.**; Francica, E.; Caruso, R.; De Luca, L.; Russo, E.; De Sarro, G.; Chimirri, A. Synthesis and Anticonvulsant Properties of 1,2,3,4-Tetrahydroisoquinolin-1-Ones. *Arkivoc* **2004**, 2004 (5), 170–180. <https://doi.org/10.3998/ark.5550190.0005.516>.
- (82) Macchiarulo, A.; De Luca, L.; Costantino, G.; **Barreca, M. L.**; Gitto, R.; Pellicciari, R.; Chimirri, A. QSAR Study of Anticonvulsant Negative Allosteric Modulators of the AMPA Receptor. *J. Med. Chem.* **2004**, 47 (7), 1860–1863. <https://doi.org/10.1021/jm0310838>.

- (83) **Barreca, M. L.***; Rao, A.; De Luca, L.; Zappalà, M.; Gurnari, C.; Monforte, P.; De Clercq, E.; Van Maele, B.; Debyser, Z.; Witvrouw, M.; Briggs, J. M.; Chimirri, A. Efficient 3D Database Screening for Novel HIV-1 Inhibitors. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **2004**, 44 (4), 1450–1455. <https://doi.org/10.1021/ci034296e>.
- (84) Gitto, R.; **Barreca, M. L.**; De Luca, L.; Chimirri, A. New Trends in the Development of AMPA Receptor Antagonists. *Expert Opin. Ther. Pat.* **2004**, 14 (8), 1199–1213. <https://doi.org/10.1517/13543776.14.8.1199>.
- (85) De Luca, L.; Macchiarulo, A.; Costantino, G.; **Barreca, M. L.**; Gitto, R.; Chimirri, A.; Pellicciari, R. Binding Modes of Noncompetitive AMPA Antagonists: A Computational Approach. *Farmaco* **2003**, 58 (2), 107–113. [https://doi.org/10.1016/S0014-827X\(02\)00027-7](https://doi.org/10.1016/S0014-827X(02)00027-7).
- (86) Gitto, R.; **Barreca, M. L.**; De Luca, L.; De Sarro, G.; Ferreri, G.; Quartarone, S.; Russo, E.; Constanti, A.; Chimirri, A. Discovery of a Novel and Highly Potent Noncompetitive AMPA Receptor Antagonist. *J. Med. Chem.* **2003**, 46 (1), 197–200. <https://doi.org/10.1021/jm0210008>.
- (87) **Barreca, M. L.**; Lee, K. W.; Chimirri, A.; Briggs, J. M. Molecular Dynamics Studies of the Wild-Type and Double Mutant HIV-1 Integrase Complexed with the 5CITEP Inhibitor: Mechanism for Inhibition and Drug Resistance. *Biophys. J.* **2003**, 84 (3), 1450–1463. [https://doi.org/10.1016/S0006-3495\(03\)74958-3](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(03)74958-3).
- (88) **Barreca, M. L.***; Gitto, R.; Quartarone, S.; De Luca, L.; De Sarro, G.; Chimirri, A. Pharmacophore Modeling as an Efficient Tool in the Discovery of Novel Noncompetitive AMPA Receptor Antagonists. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **2003**, 43 (2), 651–655. <https://doi.org/10.1021/ci025625q>.
- (89) **Barreca, M. L.**; Chimirri, A.; De Clercq, E.; De Luca, L.; Monforte, A. M.; Monforte, P.; Rao, A.; Zappalà, M. Anti-HIV Agents: Design and Discovery of New Potent RT Inhibitors. *Farmaco* **2003**, 58 (3), 259–263. [https://doi.org/10.1016/S0014-827X\(03\)00024-7](https://doi.org/10.1016/S0014-827X(03)00024-7).
- (90) De Luca, L.; Pedretti, A.; Vistoli, G.; **Barreca, M. L.**; Villa, L.; Monforte, P.; Chimirri, A. Analysis of the Full-Length Integrase-DNA Complex by a Modified Approach for DNA Docking. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **2003**, 310 (4), 1083–1088. <https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2003.09.120>.
- (91) Carrieri, A.; Carotti, A.; **Barreca, M. L.**; Altomare, C. Binding Models of Reversible Inhibitors to Type-B Monoamine Oxidase. *J. Comput. Aided. Mol. Des.* **2002**, 16 (11), 769–778. <https://doi.org/10.1023/A:1023815426730>.
- (92) **Barreca, M. L.**; Balzarini, J.; Chimirri, A.; De Clercq, E.; De Luca, L.; Hölftje, H. D.; Hölftje, M.; Monforte, A. M.; Monforte, P.; Pannecouque, C.; Rao, A.; Zappalà, M. Design, Synthesis, Structure - Activity Relationships, and Molecular Modeling Studies of 2,3-Diaryl-1,3-Thiazolidin-4-Ones as Potent Anti-HIV Agents. *J. Med. Chem.* **2002**, 45 (24), 5410–5413. <https://doi.org/10.1021/jm020977+>.
- (93) **Barreca, M. L.**; Chimirri, A.; De Luca, L.; Monforte, A. M.; Monforte, P.; Rao, A.; Zappalà, M.; Balzarini, J.; De Clercq, E.; Pannecouque, C.; Witvrouw, M. Discovery of 2,3-Diaryl-1,3-Thiazolidin-4-Ones as Potent Anti-HIV-1 Agents. *Bioorganic Med. Chem. Lett.* **2001**, 11 (13), 1793–1796. [https://doi.org/10.1016/S0960-894X\(01\)00304-3](https://doi.org/10.1016/S0960-894X(01)00304-3).
- (94) **Barreca, M. L.**; Carotti, A.; Carrieri, A.; Chimirri, A.; Monforte, A. M.; Pellegrini Calace, M.; Rao, A. Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA) and Docking Studies of Non- Nucleoside HIV-1 RT Inhibitors (NNIs). *Bioorganic Med. Chem.* **1999**, 7 (11), 2283–2292. [https://doi.org/10.1016/S0968-0896\(99\)00181-9](https://doi.org/10.1016/S0968-0896(99)00181-9).
- (95) Altomare, C.; Cellamare, S.; Carotti, A.; **Barreca, M. L.**; Chimirri, A.; Monforte, A. M.; Gasparrini, F.; Villani, C.; Cirilli, M.; Mazza, F. Substituent Effects on the Enantioselective Retention of Anti-HIV 5-Aryl- Δ^2 -1,2,4-Oxadiazolines on R,R-DACH-DNB Chiral Stationary Phase. *Chirality* **1996**, 8 (8), 556–566. [https://doi.org/10.1002/\(sici\)1520-636x\(1996\)8:8<556::aid-chir4>3.0.co;2-7](https://doi.org/10.1002/(sici)1520-636x(1996)8:8<556::aid-chir4>3.0.co;2-7).
- (96) Carrieri, A.; Altomare, C.; **Barreca, M. L.**; Contento, A.; Carotti, A.; Hansch, C. Papain Catalyzed Hydrolysis of Aryl Esters: A Comparison of the Hansch, Docking and CoMFA Methods. *Farmaco* **1994**, 49 (9), 573–585.