

Procedura di chiamata ad 1 posto di professore universitario di ruolo, fascia degli ordinari ai sensi dell'Art. 18, c. 4 della L. 240/2010, Dipartimento di Scienze, Gruppo Scientifico Disciplinare (GSD) 03/CHEM-07 Chimica Farmaceutica, Tossicologica, Nutraceutico Alimentare, delle Fermentazioni e dei Prodotti per il Benessere e per la Salute (già settore concorsuale 03/D1, Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutico-alimentari) Settore Scientifico Disciplinare (SSD) CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica)

VERBALE N. 2

Alle ore 14.00 del giorno 30/08/2024 si è svolta la riunione in forma telematica tra i seguenti Professori:

- Prof. Roberto Di Santo - Professore Universitario di ruolo di Prima Fascia presso l'Università degli Studi "La Sapienza" di Roma – settore concorsuale 03/D1 “Chimica e Tecnologie Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutico-Alimentari” settore scientifico-disciplinare CHIM/08 “Chimica Farmaceutica”
- Prof. Marco Macchia - Professore Universitario di ruolo di Prima Fascia presso l'Università di Pisa – settore concorsuale 03/D1 “Chimica e Tecnologie Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutico-Alimentari” settore scientifico-disciplinare CHIM/08 “Chimica Farmaceutica”
- Prof. Vincenzo Summa - Professore Universitario di ruolo di Prima Fascia presso l'Università degli Studi di Napoli “Federico II” – settore concorsuale 03/D1 “Chimica e Tecnologie Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutico-Alimentari” settore scientifico-disciplinare CHIM/08 “Chimica Farmaceutica”

membri della Commissione nominata con D.R. n. 73818 del 19/07/2024.

La Commissione, presa visione delle domande e della documentazione inviata, delle pubblicazioni effettivamente inviate, delle eventuali esclusioni operate dagli uffici e delle rinunce sino ad ora pervenute, decide che i candidati da valutare ai fini della procedura sono n. 3 (tre), e precisamente:

1. Prof.ssa Lucia GRUMETTO
2. Prof. Orazio NICOLOTTI
3. Prof. Dante ROTILI

I Commissari dichiarano, allo stato e per quanto di propria conoscenza, di non avere relazioni di parentela ed affinità entro il 4° grado incluso con gli stessi (art. 5

comma 2 D.lgs. 07.05.1948 n.1172) e che non sussistono le cause di astensione di cui agli artt. 51 e 52 c.p.c.

La Commissione, quindi, procede a visionare la documentazione che i candidati hanno inviato presso l'Università degli Studi Roma Tre.

Vengono, dunque, prese in esame, secondo l'ordine alfabetico dei candidati, solo le pubblicazioni corrispondenti all'elenco delle stesse allegato.

Il Presidente ricorda che le pubblicazioni redatte in collaborazione con i membri della Commissione e con i terzi possono essere valutate solo se rispondenti ai criteri individuati nella prima riunione.

1 Vengono esaminate le pubblicazioni della candidata Prof.ssa Lucia GRUMETTO; da parte di ciascun commissario, si procede all'esame del curriculum, dei titoli e delle pubblicazioni ai fini della formulazione dei singoli giudizi da parte degli stessi commissari; poi, ciascun Commissario formula il proprio giudizio individuale e la Commissione quello collegiale.

I giudizi dei singoli commissari e quello collegiale sono allegati al presente verbale quale sua parte integrante (**Allegato A**).

2 Vengono esaminate le pubblicazioni del candidato Prof. Orazio NICOLOTTI; da parte di ciascun commissario, si procede all'esame dei titoli e delle pubblicazioni ai fini della formulazione dei singoli giudizi da parte degli stessi commissari; poi, ciascun Commissario formula il proprio giudizio individuale e la Commissione quello collegiale. I giudizi dei singoli commissari e quello collegiale sono allegati al presente verbale quale sua parte integrante (**Allegato A**).

3 Vengono esaminate le pubblicazioni del candidato Prof. Dante ROTILI; da parte di ciascun commissario, si procede all'esame dei titoli e delle pubblicazioni ai fini della formulazione dei singoli giudizi da parte degli stessi commissari; poi, ciascun Commissario formula il proprio giudizio individuale e la Commissione quello collegiale. I giudizi dei singoli commissari e quello collegiale sono allegati al presente verbale quale sua parte integrante (**Allegato A**).

Terminata la valutazione del curriculum, dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati, la Commissione inizia ad esaminare collegialmente tutti i candidati. La discussione collegiale avviene attraverso la comparazione dei giudizi individuali e collegiali espressi sui candidati (sempre considerati in ordine alfabetico); la comparazione avviene sui titoli e sui lavori scientifici inviati. La Commissione sulla base delle valutazioni collegiali formulate esprime i giudizi comparativi sui candidati. I giudizi comparativi formulati dalla Commissione sono allegati al presente verbale quale sua parte integrante (**Allegato B**).

Terminata la valutazione comparativa dei candidati, il Presidente invita la Commissione ad indicare il vincitore della procedura di chiamata.

Ciascun commissario, dunque, esprime un giudizio per ciascun candidato; è dichiarato vincitore il candidato che ha ottenuto valutazione complessiva migliore.

Pertanto la Commissione, all'unanimità dei componenti, indica il **CANDIDATO Prof. Dante ROTILI** vincitore della procedura di chiamata per la copertura di n. 1 posto di Professore universitario di I fascia per il Gruppo Scientifico Disciplinare (GSD) 03/CHEM-07 Chimica Farmaceutica, Tossicologica, Nutraceutico Alimentare, delle Fermentazioni e dei Prodotti per il Benessere e per la Salute (già settore concorsuale 03/D1, Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutico-alimentari) Settore Scientifico Disciplinare (SSD) CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica), Dipartimento di Scienze.

Il Presidente, dato atto di quanto sopra invita la Commissione a redigere collegialmente la relazione in merito alla proposta di chiamata controllando gli allegati che ne fanno parte integrante; la relazione (**Allegato 2**) viene, infine, riletta dal Presidente ed approvata senza riserva alcuna dai Commissari, che la approvano all'unanimità.

Infine, il Prof. Marco Macchia, Presidente della presente Commissione, delega il segretario Prof. Roberto Di Santo a consegnare tutti gli atti concorsuali (costituiti da una copia dei verbali delle singole riunioni, dei quali costituiscono parte integrante i giudizi individuali e collegiali espressi su ciascun candidato, ed una copia della relazione), al Responsabile del Procedimento massimo.calano@uniroma3.it ed in cc a giovanna.mele@uniroma3.it e diego.mazzamuto@uniroma3.it per i conseguenti adempimenti.

La Commissione viene sciolta alle ore 19.15.

Roma, 30/08/2024

Letto approvato e sottoscritto seduta stante.

Per la Commissione

 Prof. Roberto Di Santo

ALLEGATO A)
Giudizi sui titoli e sulle pubblicazioni:

1. CANDIDATO: Prof.ssa Lucia GRUMETTO

Note generali

Dalla documentazione presentata si evince che:

Notizie biografiche

Carriera

La candidata, dopo essersi laureata in Scienze Biologiche presso l'Università degli Studi di Napoli "Federico II", ha conseguito una seconda laurea in Farmacia presso la stessa Università. Dal 1987 al 2002 ha ricoperto il ruolo di Tecnico di IV livello e successivamente di Funzionario Tecnico di VIII livello presso lo stesso Ateneo, nel quale ha poi preso servizio prima come Ricercatore (2002-2020) e quindi come Professore Associato (dal 2020) per il SSD CHIM/08 (Chimica Farmaceutica). Dal 12 al 19 maggio 2024 ha svolto mobilità Erasmus per docenti presso L'Università di Edimburgo, UK. Nel 2024 ha conseguito l'abilitazione a Professore di I fascia per il SSD CHIM/08.

Attività didattica

La candidata dichiara, senza dare riferimenti temporali, di avere svolto attività didattica come titolare di diversi insegnamenti del SSD CHIM/08 e di uno riferibile al SSD CHIM/09. Dichiara di essere stata relatrice di numerose tesi di laurea sperimentali e compilative nei corsi di laurea in Farmacia, Controllo di Qualità, CTF e Scienze Nutraceutiche ed è stata tutor del progetto di ricerca di un dottorando.

Ruoli Coordinamento

E' membro del Collegio di dottorato "Nutraceuticals and functional foods and human health" - Università degli Studi di Napoli "Federico II". E' stata membro del Collegio di Disciplina dell'Università degli Studi di Napoli "Federico II" dal 2018 al 2020; attualmente è membro del Collegio di Disciplina dell'Università di Salerno e dell'Università di Milano.

Attività e linee di ricerca

La candidata svolge attività di ricerca nell'ambito dell'analisi chimico-farmaceutica comprendendo, oltre agli aspetti relativi all'analisi dei farmaci, anche gli aspetti relativi al monitoraggio di sostanze ad attività interferente endocrina o comunque tossicologicamente rilevanti, presenti in fluidi biologici, matrici ambientali, cosmetiche ed alimentari. Ha esperienza nello sviluppo ed applicazione di metodi analitici applicati a studi di farmacocinetica.

Produzione scientifica complessiva

Dal curriculum della candidata emergono un'attività di ricerca e una produzione scientifica (1993-2024) complessivamente di buon livello, con qualche discontinuità iniziale, ma continue nel tempo a partire dal 2011 e caratterizzate da una adeguata maturità scientifica. La produzione scientifica risulta coerente con la declaratoria del SSD CHIM/08. La candidata presenta una lista di 83 pubblicazioni relative al periodo 1993-2024, nella quale 75 pubblicazioni risultano indicizzate su Scopus ed una su WOS. I 76 lavori hanno un numero di citazioni totali pari a 2250, citazioni medie 29,60, hindex 27 (Scopus); IF totale delle pubblicazioni presentate 313,636 e IF medio 3,779 calcolato sulle 83 pubblicazioni.

Pubblicazioni selezionate dalla candidate GRUMETTO.

1. Into the toxicity potential of an array of parabens by biomimetic liquid chromatography, cell viability assessments and in silico predictions.

Neri I, MacCallum J, Di Lorenzo R, Russo G, Lynen F, Grumetto L.

Sci Total Environ. 2024 Mar 20;917:170461.

Posizione rilievo: Ultimo autore

IF 8.2

Q1 (Environmental Sciences)

Citazioni 0

2. High-throughput and reliable assessments of the ionization constant of monoprotic organic acids through an arginine based mixed mode HPLC.

Russo G, Kajtazi A, Vallaro M, Surmont P, Ermondi G, Anderson S, Grumetto L, Caron G, Lynen F.

J Pharm Biomed Anal. 2023 Oct 25;235:115604.

Posizione rilievo: -

IF 3.1

Q2 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni 0

3. Lipophilicity profiling and cell viability assessment of a selected panel of endocrine disruptors. Russo G, Piccolo M, Neri I, Ferraro MG, Santamaria R, Grumetto L.

Chemosphere. 2023 Feb;313:137569.

Posizione rilievo: Ultimo autore e co-corresponding

IF 8.1

Q1 (Environmental Sciences)

Citazioni 1

4. Parabens Permeation through Biological Membranes: A Comparative Study Using Franz Cell Diffusion System and Biomimetic Liquid Chromatography

Neri I, Laneri S, Di Lorenzo R, Dini I, Russo G, Grumetto L.

Molecules. 2022 Jul 1;27(13):4263.

Posizione rilievo: Ultimo autore e co-corresponding

IF 4.2 Q2 (Chemistry, multidisciplinary)
Citazioni 14

5. Monitoring of Pollutants Content in Bottled and Tap Drinking Water in Italy.
Russo G, Laneri S, Di Lorenzo R, Neri I, Dini I, Ciampaglia R, Grumetto L.
Molecules. 2022 Jun 21;27(13):3990
Posizione rilievo: Ultimo autore e corresponding
IF 4.2 Q2 (Chemistry, multidisciplinary)
Citazioni 11

6. Bisphenol A and its analogues: from their occurrence in foodstuffs marketed in Europe to improved monitoring strategies-a review of published literature from 2018 to 2023. Neri I, Russo G, Grumetto L.
Arch Toxicol. 2024 Jun 12. (Review article)
Posizione rilievo: Ultimo autore
IF 4.8 Q1 (Toxicology)
Citazioni 0

7. $\Delta\log K_{ow}$ IAM: can we afford estimation of small molecules' blood-brain barrier passage based upon in silico phospholipophilicity?
Grumetto L, Russo G.
ADMET DMPK. 2021 Dec 15;9(4):267-281, Collection 2021.
Posizione rilievo: Primo autore
IF 3.4 Q2 (Medicinal Chemistry)
Citazioni 5

8. Comprehensive two-dimensional liquid chromatography as a biomimetic screening platform for pharmacokinetic profiling of compound libraries in early drug development.
G. Russo; L. Grumetto; M. Baert; F. Lynen.
Anal Chim Acta. 2021 Jan 15;1142:157-168.
Posizione rilievo: -
IF 5.7 Q1 (Analytical Chemistry)
Citazioni 6

9. Entry of therapeutics into the brain: Influence of exposed polarity calculated in silico and measured in vitro by supercritical fluid chromatography.
Russo G, Barbato F, Grumetto L, Philippe L, Lynen F, Goetz GH.
Int J Pharm. 2019 Apr 5;560:294-305.
Posizione rilievo: -
IF 5.3 Q1 (Pharmacology and Pharmacy)
Citazioni 10

10. Scrutinizing the interactions between bisphenol analogues and plasma proteins: Insights from biomimetic liquid chromatography, molecular docking simulations and in silico predictions.

Grumetto L, Barbato F, Russo G.

Environ Toxicol Pharmacol. 2019 May;68:148-154.

Posizione rilievo: Primo autore

IF 4.2

Q1 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni 10

11. Simultaneous determination of fifteen multiclass organic pollutants in human saliva and serum by liquid chromatography-tandem ultraviolet/fluorescence detection: A validated method.

Russo G, Barbato F, Mita DG, Grumetto L.

Biomed Chromatogr. 2018 Nov 8:e4427.

Posizione rilievo: Ultimo autore e corresponding

IF 1.8

Q3 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni 15

12. Human exposure to bisphenol AF and diethylhexylphthalate increases susceptibility to develop differentiated thyroid cancer in patients with thyroid nodules.

Marotta V, Russo G, Gambardella C, Grasso M, La Sala D, Chiofalo MG, D'Anna R, Puzziello A, Docimo G, Masone S, Barbato F, Colao A, Faggiano A, Grumetto L.

Chemosphere. 2019. Mar;218:885-894.

Posizione rilievo: Ultimo autore e co-corresponding

IF 8.1

Q1 (Environmental Sciences)

Citazioni 70

13. Cytotoxicity of seven bisphenol analogues compared to bisphenol A and relationships with membrane affinity data.

G. Russo, A. Capuozzo, F. Barbato, C. Irace, R. Santamaria, L. Grumetto.

Posizione rilievo: Ultimo autore e co-corresponding

Chemosphere 201, 432-443, 2018

IF 8.1

Q1 (Environmental Sciences)

Citazioni 92

14. Screening therapeutics according to their uptake across the blood-brain barrier: A high throughput method based on immobilized artificial membrane liquid chromatography-diodearray-detection coupled to electrospray-time-of-flight mass spectrometry.

Russo G, Grumetto L, Szucs R, Barbato F, Lynen F.

Eur J Pharm Biopharm. 2018 Feb 7. pii: S0939-6411(17)31227-4.

Posizione rilievo: -

IF 4.4

Q1 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni 15

15. Determination of in Vitro and in Silico Indexes for the Modeling of Blood-Brain Barrier Partitioning of Drugs via Micellar and Immobilized Artificial Membrane Liquid Chromatography.

Russo G, Grumetto L, Szucs R, Barbato F, Lynen F.
J Med Chem. 2017 May 11;60(9):3739-3754.

Posizione rilievo: -

IF 6.8 Q1 (Medicinal Chemistry)

Citazioni 25

16. Monitoring of bisphenol A and bisphenol S in thermal paper receipts from the Italian market and estimated transdermal human intake: A pilot study.

Russo G, Barbato F, Grumetto L.
Sci Total Environ. 2017 Apr 29;599-600:68-75.

Posizione rilievo: Ultimo nome e corrisponding

IF 8.2 Q1 (Environmental Sciences)

Citazioni 70

17. Prediction and mechanism elucidation of analyte retention on phospholipid stationary phases (IAM- HPLC) by in silico calculated physico-chemical descriptors.

G. Russo, L. Grumetto, F. Barbato, G. Vistoli, A. Pedretti.
Eur J Pharm Sci. 2017 Mar 1;99:173-184.

Posizione rilievo: -

IF 4.3 Q1 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni 25

18. A validated LC/ UV method for a rapid determination of four adulterating drugs in herbal slimming capsules.

Russo G, Barbato F, Grumetto L.
J Pharm Biomed Anal. 2016 Jan 5;117:436-45

Posizione rilievo: Ultimo autore e corrisponding

IF 3.1 Q2 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni 8

19. Immobilized Artificial Membrane HPLC Derived Parameters vs PAMPA-BBB Data in Estimating in Situ Measured Blood-Brain Barrier Permeation of Drugs.

Grumetto L, Russo G, Barbato F.
Mol Pharm. 2016 Aug 1;13(8):2808-16.

Posizione rilievo: Primo autore

IF 4.5 Q1 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni 26

20. Polar interactions drug/phospholipids estimated by IAM-HPLC vs cultured cell line passage data: Their relationships and comparison of their effectiveness in predicting drug human intestinal absorption.

Grumetto L, Russo G, Barbato F.

Int J Pharm. 2016 Jan 15 Mar 16;500(1-2):275-90.

Posizione rilievo: Primo autore

IF 5.3

Q1 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni 27

21. Relationships between human intestinal absorption and polar interactions drug/phospholipids estimated by IAM-HPLC.

Grumetto L, Russo G, Barbato F.

Int J Pharm. 2015 Jul 15;489(1-2):186-94.

Posizione rilievo: Primo autore

IF 5.3

Q1 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni 28

22. Indexes of polar interactions between ionizable drugs and membrane phospholipids measured by IAM-HPLC: their relationships with data of Blood-Brain Barrier passage.

Grumetto L, Russo G, Barbato F.

Eur J Pharm Sci. 2014 Dec 18;65:139-46.

Posizione rilievo: Primo autore

IF 4.3

Q1 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni 34

23. Lipophilic and polar interaction forces between acidic drugs and membrane phospholipids encoded in IAM-HPLC indexes: their role in membrane partition and relationships with BBB permeation data.

Grumetto L, Carpentiero C, Di Vaio P, Frecentese F, Barbato F.

J Pharm Biomed Anal. 2013 Mar 5;75:165-72.

Posizione rilievo: Primo autore

IF 3.1

Q2 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni 30

24. Lipophilic and electrostatic forces encoded in IAM-HPLC indexes of basic drugs: their role in membrane partition and their relationships with BBB passage data.

Grumetto L, Carpentiero C, Barbato F.

Eur J Pharm Sci. 2012 Apr 11;45(5):685-92

Posizione rilievo: Primo autore

IF 4.3

Q1 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni 42

25. Enantioselective retention of beta-blocking agents on human serum albumin and alphasialic glycoprotein HPLC columns: relationships with different scales of lipophilicity.

Barbato F, Carpentiero C, Grumetto L, La Rotonda MI.

Eur J Pharm Sci. 2009 Dec 8;38(5):472-8.

Posizione rilievo: -

IF 4.3

Q1 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni 25

Le 25 pubblicazioni presentate per la valutazione, tra le quali una review, sono relative al periodo 2009-2024, e sono complessivamente di buon livello editoriale: 18/25 si posizionano nel primo quartile, 6/25 nel secondo, 1/25 nel terzo (Journal Citation Reports – WOS). Dall'analisi di ciascuna delle 25 pubblicazioni selezionate si rileva che queste hanno un buon livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza e sono pienamente congruenti con il SSD CHIM/08. Per quanto attiene la collocazione editoriale in termini di categoria (analisi della subject category di WOS), 2/25 pubblicazioni presentate dalla candidata sono classificate da WOS come Chemistry, Medicinal, 14 come Pharmacology and Pharmacy, 5 Environmental Sciences, 2 Chemistry, Multidisciplinary, 1 Toxicology, 1 Chemistry, Analytical. La candidata ha una posizione preminente in 18 delle 25 pubblicazioni. Nel dettaglio è autore unico di riferimento in 4 pubblicazioni, co-autore di riferimento in 4 pubblicazioni, ultimo autore in 10 pubblicazioni e primo autore in 8 pubblicazioni.

Organizzazione o partecipazione come relatore a convegni

La candidata riporta di essere Membro dello Scientific Board di un Meeting (Phoenix, COST) e riporta tre comunicazioni orali su invito e una keynote in Meeting internazionali, nonché varie relazioni svolte a livello locale.

Premi o riconoscimenti.

La candidata riporta due best Poster awards e un lavoro come “most cited paper”.

Attività Editoriale

E' membro dell'Editorial Board di 2 riviste.

Collaborazioni a livello nazionale o internazionale

Le sue attività sono caratterizzate da collaborazioni a livello nazionale o internazionale come rilevabile dalle pubblicazioni e dal brevetto in comune con coautori internazionali (12 gruppi; 33 pubblicazioni) e nazionali (40 gruppi; 83 pubblicazioni e 1 brevetto) e da un'interazione in rete COST.

Responsabilita' scientifica per progetti di ricerca internazionali e nazionali, ammessi al finanziamento sulla base di bandi competitivi che prevedano la revisione tra pari

La candidata è responsabile di un progetto competitivo come PI (CAMITIE), di uno come co-PI (POR) e responsabile locale di progetto di bando a cascata, nonché beneficiaria responsabile di fondi progetto giovani ricercatori.

Trasferimento Tecnologico/Attività Brevettuale

In relazione all'attività di trasferimento tecnologico, la candidata riporta di essere co-inventore di una domanda di brevetto depositato presso l'UIBM e inventore e co-detentore di copyright di un software fruibile online.

Si riportano, quindi, i giudizi individuali:

Commissario Prof. Roberto Di Santo

La Prof.ssa Lucia Grumetto ha una buona esperienza di ricerca avendo partecipato come responsabile scientifico ad un progetto di ricerca finanziato su base competitiva e ad uno come co-responsabile, ed essendo responsabile locale di progetto di bando a cascata, nonché beneficiaria responsabile di fondi progetto giovani ricercatori. Dal curriculum della candidata emergono un'attività di ricerca e una produzione scientifica coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08, complessivamente di livello buono, continue nel tempo a partire dal 2011, caratterizzate da buona maturità scientifica ed indici bibliometrici buoni. Ai fini della presente valutazione, presenta 25 pubblicazioni che risultano complessivamente di buon livello in termini di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza editoriale. Le pubblicazioni sono tutte pienamente coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08, sono collocate nella categoria Medicinal Chemistry o affini e trattano di diversi approcci della analisi farmaceutica e tossicologica. La candidata ha una posizione preminente in 18 delle 25 pubblicazioni. L'attività di terza missione della candidata è documentata da una domanda di un brevetto presso l'UIBM e dal possesso di copyright di un software fruibile online. Le attività svolte dalla candidata in incarichi istituzionali, organizzativi e di servizio appaiono complessivamente buone. L'attività didattica della Prof.ssa Grumetto è buona, per la maggior parte svolta nell'ambito degli insegnamenti del settore CHIM/08. Ha contribuito significativamente alla formazione di numerosi tesisti e di un dottorando. Il giudizio sull'attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione è quindi complessivamente buono.

Commissario Prof. Marco Macchia

La Prof.ssa Lucia Grumetto attualmente ricopre la posizione di professore associato nel settore scientifico-disciplinare CHIM/08 Chimica Farmaceutica presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università degli studi di Napoli "Federico II". La candidata presenta una produzione scientifica complessivamente di buon livello e continua a partire dal 2011, con parziali discontinuità nella fase iniziale della carriera,

evidenziando una buona capacità di gestione e coordinamento di progetti di ricerca. La candidata svolge attività di ricerca incentrate sull'analisi chimico-farmaceutico tossicologica: analisi dei farmaci; monitoraggio di sostanze ad attività interferente endocrina; sviluppo ed applicazione di metodi analitici per studi farmacocinetici e tossicologici. Tali ricerche sono congruenti con l'SSD CHIM/08. Le 25 pubblicazioni presentate dalla candidata hanno complessivamente un buon livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e di rilevanza editoriale e sono pienamente coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08. La candidata ha una posizione preminente in 18 delle 25 pubblicazioni. Co-autore di una domanda di brevetto presentata all'UIBM, è responsabile di un progetto competitivo come PI e di uno come co-PI, beneficiaria responsabile di fondi progetto giovani ricercatori e responsabile locale di un progetto di bando a cascata, mostrando buone attitudini come responsabile di unità.

La sua attività didattica è complessivamente buona, comprendendo la formazione di tesisti e un dottorando, e svolta in corsi per la maggior parte propri del SSD CHIM/08. La Prof.ssa Grumetto è inoltre membro del Collegio di dottorato "Nutraceuticals and functional foods and human health" dell'Università degli Studi di Napoli "Federico II", oltre ad essere o essere stata Membro di Collegi di Disciplina. In sintesi, il giudizio complessivo sull'attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione della Prof.ssa Grumetto è buono.

Commissario Prof. Vincenzo Summa

La Prof.ssa Lucia Grumetto è attualmente professore associato nel settore scientifico disciplinare CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica) presso l'Università degli studi di Napoli "Federico II", Dipartimento di Farmacia. La sua produzione scientifica risulta complessivamente di buon livello, caratterizzata da buoni parametri bibliometrici, continua nel tempo a partire dal 2011, salvo nella fase iniziale della carriera ove presenta alcune discontinuità. La sua attività di ricerca scientifica mostra una progressiva crescita nella gestione dei progetti di ricerca. Le linee di ricerca sono sviluppate nell'ambito dell'analisi chimico-farmaceutica e vertono su aspetti relativi all'analisi dei farmaci, aspetti relativi al monitoraggio di sostanze ad attività interferente endocrina presenti in fluidi biologici, matrici ambientali, cosmetiche ed alimentari. Ha esperienza nello sviluppo ed applicazione di metodi analitici applicati a studi farmacocinetici e tossicologici.

Tali ricerche sono coerenti con le tematiche del Settore Scientifico Disciplinare CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica). La candidata presenta 25 pubblicazioni che sono complessivamente di buon livello editoriale, e con un buon livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. Le pubblicazioni sono tutte pienamente coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08, sono collocate nella categoria Medicinal Chemistry o affini. La candidata ha una posizione preminente in 18 delle 25 pubblicazioni. E' autore unico di riferimento in 4 pubblicazioni, co-autore di riferimento in 4 pubblicazioni, ultimo autore in 10 pubblicazioni e primo autore in 8 pubblicazioni. E' co-autore di una domanda di brevetto depositata all'UIBM ed è stata responsabile scientifica o co-

responsabile di unità di 2 finanziamenti selezionati con bando competitivo basato su revisione tra pari, responsabile locale di progetto di bando a cascata e beneficiaria responsabile di fondi progetto giovani ricercatori. Questo rileva una buona capacità di coordinamento di attività di ricerca. L'attività didattica svolta si colloca quasi interamente nell'ambito di insegnamenti del Settore Scientifico Disciplinare CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica) ed è buona. Si è occupata della formazione di molti tesisti ed è stata tutor di uno studente di dottorato. E' membro del Collegio di dottorato "Nutraceuticals and functional foods and human health" dell'Università degli Studi di Napoli "Federico II" e Membro di Collegi di Disciplina. In conclusione, il giudizio sull'attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione è quindi complessivamente buono.

Giudizio collegiale:

La Prof.ssa Lucia Grumetto è attualmente professore associato nel settore scientifico disciplinare CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica), presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università degli studi di Napoli "Federico II". La produzione scientifica della Prof.ssa Grumetto risulta essere continua a partire dal 2011 e con alcune discontinuità nella fase iniziale, complessivamente di buon livello. Le sue ricerche si concentrano su aspetti analitico-farmaceutico-tossicologici, relativi all'analisi dei farmaci, al monitoraggio di sostanze ad attività interferente endocrina o comunque tossicologicamente rilevanti, presenti in fluidi biologici, matrici ambientali, cosmetiche ed alimentari, nonché sull'applicazione di metodi analitici volti allo studio di specifici aspetti farmacocinetici e tossicologici, e sulla risoluzione di problematiche farmacocinetiche inerenti la somministrazione di farmaci a livello oculare. Tali ricerche sono congruenti con le tematiche del Settore Scientifico Disciplinare CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica). Le 25 pubblicazioni della candidata sono complessivamente di buon livello editoriale, tutte pienamente coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08, e con un buon livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. Le pubblicazioni sono collocate nella categoria Medicinal Chemistry o affini e trattano di diversi approcci della analisi farmaceutica e tossicologica. La candidata in 18 delle 25 pubblicazioni risulta in posizione preminente. La Prof.ssa Lucia Grumetto ha una buona esperienza di ricerca avendo partecipato come responsabile scientifico ad un progetto di ricerca finanziato su base competitiva e ad uno come co-responsabile, ed essendo responsabile locale di progetto di bando a cascata, nonché beneficiaria responsabile di fondi progetto giovani ricercatori. L'attività di terza missione della candidata è documentata da una domanda di brevetto depositata presso l'UIBM ed è inventore e co-detentore di copyright di un software fruibile online. Le attività svolte dalla candidata in incarichi istituzionali, organizzativi e di servizio appaiono complessivamente buone. L'attività didattica svolta si colloca quasi interamente nell'ambito di insegnamenti del Settore Scientifico Disciplinare CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica) ed è buona. In conclusione, il giudizio complessivo sull'attività

scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione della Prof. Lucia Grumetto è buono.

2. CANDIDATO: Prof. Orazio NICOLOTTI

Note generali

Dalla documentazione presentata si evince che:

Notizie biografiche

Carriera

Il candidato, dopo essersi laureato in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche presso l'Università di Bari "Aldo Moro", ha conseguito il titolo di dottore di ricerca in Chimica del Farmaco presso lo stesso Ateneo nel 2001. Nel corso del Dottorato di ricerca ha svolto periodi di formazione presso l'Università di Milano Bicocca e presso la University of Sheffield (UK) per un periodo complessivo di 14 mesi. Al termine del Dottorato, nel periodo 2001-2002 è stato PostDoc presso la University of Sheffield (UK). Dal 2002 presta servizio come Ricercatore presso il Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco, Università di Bari 'Aldo Moro' per il SSD CHIM/08 - Chimica Farmaceutica. A partire dal 2015 ricopre le seguenti posizioni tutte presso il Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco, Università di Bari 'Aldo Moro': 2015-2016 (2 Febbraio), Professore Associato (SSD: CHIM/08); 2016 (3 Febbraio-31 Luglio), Ricercatore (SSD: CHIM/08); 2016 (1 agosto) -2019 (15 gennaio), Professore Associato (SSD: CHIM/08); 2019 (16 gennaio – 1 dicembre), Ricercatore (SSD: CHIM/08); 2019 (2 dicembre) -2020 (19 aprile), Professore Associato (SSD: CHIM/08). Nel 2017 ha conseguito l'abilitazione scientifica nazionale a Professore Ordinario per il SSD CHIM/08 e dal 20 aprile 2020, è Professore Ordinario (SSD: CHIM/08) sempre presso il Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco, Università di Bari 'Aldo Moro'.

Attività Didattica

A partire dall'A.A. 2007-2008 ha svolto una continua e intensa attività didattica presso l'Università di Bari "Aldo Moro" e presso l'Università di Roma Tor Vergata, nell'ambito di diversi insegnamenti la maggior parte dei quali pienamente congruenti con il SSD CHIM/08 e in misura minore in discipline chimiche di base. Nel periodo 2011-2016 ha svolto un modulo didattico in un Master di II livello. Dal 2007 ha seguito i progetti di tesi di studenti iscritti a corsi di studio della classe LM-13 dell'Università di Bari (14) e Roma Tor Vergata (2), nonché i progetti di ricerca di dottorandi afferenti a vari corsi di Dottorato inerenti le scienze farmaceutiche (10); è stato supervisor di uno studente Erasmus e relatore di tesi di Master di II livello (2).

Ruoli Coordinamento

Dal 2003 al 2022 è membro di Collegi di docenti di Dottorato inerenti le scienze farmaceutiche (Tecnologie Sostenibili per lo Sviluppo Industriale di Medicinali e Diagnostici, Scienze del Farmaco, Scienze Biomolecolari Farmaceutiche e Mediche, Scienze Farmaceutiche). Dal settembre 2020 al novembre 2021 è stato Coordinatore del Consiglio dei Corsi di Studio della Classe L29 presso il Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco dell'Università di Bari 'Aldo Moro'.

Attività e linee di ricerca

L'attività scientifica è focalizzata sulla chimica farmaceutica computazionale, in particolare su: sviluppo di piattaforme digitali basate su approcci di AI, per l'identificazione di nuovi composti bioattivi e la predizione di endpoint tossicologici; sviluppo di nuovi metodi di analisi computazionale, principalmente basati su algoritmi non-deterministici, per la progettazione razionale di nuovi farmaci, il *de novo* design e lo studio dell'interazione peptide-proteina; derivazione di modelli QSAR per la sicurezza chimica e tutela della salute umana e dell'ambiente; studio delle SAR e progettazione molecolare di inibitori selettivi di proteine d'interesse terapeutico. Il candidato ha competenze nel disegno di librerie combinatoriali, analisi di similarità/diversità molecolare, sviluppo di algoritmi evoluzionistici (algoritmi genetici e genetic programming), bioinformatica, tecniche 2D- e 3D-QSAR, *de novo* design, metodi di simulazione basati su docking e dinamica molecolare, metodi di AI spiegabile, tecniche di statistica multivariata e non-deterministica.

Produzione scientifica complessiva

Dal curriculum del candidato emergono un'attività di ricerca e una produzione scientifica (2000-2024) complessivamente di livello ottimo, continue nel tempo salvo brevi discontinuità in fase iniziale e caratterizzate da una piena maturità scientifica. La sua produzione scientifica risulta totalmente coerente con la declaratoria del SSD CHIM/08 e consiste di 182 pubblicazioni, con un valore dell'indice di Hirsch = 40 (Scopus) e un numero di citazioni totali pari a 4874 (Scopus); IF totale 802,684 e IF medio di 4,410; citazioni medie 26,780. E' co-autore di 11 capitoli di libri e autore di 1 articolo divulgativo.

LAVORI SCIENTIFICI PRESENTATI:

1. Nicolotti, O., Gillet, V.J., Fleming, P.J., Green, D.V.S.
Multiobjective optimization in quantitative structure-activity relationships: Deriving accurate and interpretable QSARs
(2002) Journal of Medicinal Chemistry, 45 (23), pp. 5069-5080.
ISSN: 00222623; DOI: 10.1021/jm020919o
Posizione rilievo: Primo nome
IF = 6.8 Q1 (Chemistry, Medicinal)
Citazioni = 104

2. Nicolotti, O., Carotti, A.
 QSAR and QSPR studies of a highly structured physicochemical domain
 (2006) Journal of Chemical Information and Modeling, 46 (1), pp. 264-276.
 ISSN: 15499596; DOI: 10.1021/ci050293l
 Posizione rilievo: Primo nome
 IF = 5.6 Q1 (Chemistry, Medicinal)
 Citazioni = 54

3. Catto, M., Nicolotti, O., Leonetti, F., Carotti, A., Favia, A.D., Soto-Otero, R., Méndez-Álvarez, E., Carotti, A. Structural insights into monoamine oxidase inhibitory potency and selectivity of 7-substituted coumarins from ligand- and target-based approaches
 (2006) Journal of Medicinal Chemistry, 49 (16), pp. 4912-4925.
 ISSN: 00222623; DOI: 10.1021/jm060183l
 Posizione rilievo: -
 IF = 6.8 Q1 (Chemistry, Medicinal)
 Citazioni = 113

4. Nicolotti, O., Miscioscia, T.F., Leonetti, F., Muncipinto, G., Carotti, A.
 Screening of matrix metalloproteinases available from the protein data bank: Insights into biological functions, domain organization, and zinc binding groups
 (2007) Journal of Chemical Information and Modeling, 47 (6), pp. 2439-2448.
 ISSN: 15499596; DOI: 10.1021/ci700119r
 Posizione rilievo: Primo nome
 IF = 5.6 Q1 (Chemistry, Medicinal)
 Citazioni = 40

5. Leonetti, F., Capaldi, C., Pisani, L., Nicolotti, O., Muncipinto, G., Stefanachi, A., Cellamare, S., Caccia, C., Carotti, A.
 Solid-phase synthesis and insights into structure-activity relationships of safinamide analogues as potent and selective inhibitors of type B monoamine oxidase
 (2007) Journal of Medicinal Chemistry, 50 (20), pp. 4909-4916. ISSN: 00222623; DOI: 10.1021/jm070725e.
 Posizione rilievo: -
 IF = 6.8 Q1 (Chemistry, Medicinal)
 Citazioni = 50

6. Nicolotti, O., Miscioscia, T.F., Carotti, A., Leonetti, F., Carotti, A.
 An integrated approach to ligand- and structure-based drug design: Development and application to a series of serine protease inhibitors
 (2008) Journal of Chemical Information and Modeling, 48 (6), pp. 1211-1226.
 ISSN: 15499596; DOI: 10.1021/ci800015s
 Posizione rilievo: Primo nome
 IF = 5.6 Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 45

7. *Nicolotti, O., Giangreco, I., Miscioscia, T.F., Carotti, A.
Improving quantitative structure-activity relationships through multiobjective optimization (2009) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 49 (10), pp. 2290-2302.

ISSN: 15499596; DOI: 10.1021/ci9002409

Posizione rilievo: Autore di riferimento e primo autore

IF = 5.6

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 49

8. Pisani, L., Muncipinto, G., Miscioscia, T.F., Nicolotti, O., Leonetti, F., Catto, M., Caccia, C., Salvati, P., SotoOtero, R., Mendez-Alvarez, E., Passeleu, C., Carotti, A.

Discovery of a novel class of potent coumarin monoamine oxidase B inhibitors: Development and biopharmacological profiling of 7-[(3-chlorobenzyl) oxy]-4-[(methylamino)methyl]-2H-chromen-2-one methanesulfonate (NW-1772) as a highly potent, selective, reversible, and orally active monoamine oxidase B inhibitor (2009) *Journal of Medicinal Chemistry*, 52 (21), pp. 6685-6706. ISSN: 00222623; DOI: 10.1021/jm9010127.

Posizione rilievo: -

IF = 6.8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 103

9. Stefanachi, A., Favia, A.D., Nicolotti, O., Leonetti, F., Pisani, L., Catto, M., Zimmer, C., Hartmann, R.W., Carotti, A.

Design, synthesis, and biological evaluation of imidazolyl derivatives of 4,7-disubstituted coumarins as aromatase inhibitors selective over 17- α -hydroxylase/C17-20 lyase (2011) *Journal of Medicinal Chemistry*, 54 (6), pp. 1613-1625. ISSN: 00222623; DOI: 10.1021/jm101120u.

Posizione rilievo: -

IF = 6.8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 96

10. *Nicolotti, O., Catto, M., Giangreco, I., Barletta, M., Leonetti, F., Stefanachi, A., Pisani, L., Cellamare, S., Tortorella, P., Loiodice, F., Carotti, A.

Design, synthesis and biological evaluation of 5-hydroxy, 5-substituted-pyrimidine-2,4,6-triones as potent inhibitors of gelatinases MMP-2 and MMP-9 (2012) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 58, pp. 368-376.

ISSN: 02235234; DOI: 10.1016/j.ejmech.2012.09.036

Posizione rilievo: Co-autore di riferimento e primo autore

IF = 6.7

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 44

11. Pisani, L., Barletta, M., Soto-Otero, R., Nicolotti, O., Mendez-Alvarez, E., Catto, M., Introcaso, A., Stefanachi, A., Cellamare, S., Altomare, C., Carotti, A. Discovery, biological evaluation, and structure-activity and -selectivity relationships of 6'-substituted (E)-2(benzofuran-3(2H)-ylidene)-N- methylacetamides, a novel class of potent and selective monoamine oxidase inhibitors (2013) Journal of Medicinal Chemistry, 56 (6), pp. 2651-2664. ISSN: 00222623; DOI: 10.1021/jm4000769.

Posizione rilievo: -

IF = 6.8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 54

12. Farina, R., Pisani, L., Catto, M., Nicolotti, O., Gadaleta, D., Denora, N., Soto-Otero, R., Méndez-Álvarez, E., S Passos, C., Muncipinto, G., Altomare, C.D., Nurisso, A., Carrupt, P.A., Carotti, A.

Structure-Based Design and Optimization of Multitarget-Directed 2H-Chromen-2-one Derivatives as Potent

Inhibitors of Monoamine Oxidase B and Cholinesterases

(2015) Journal of Medicinal Chemistry, 58 (14), pp. 5561-5578. ISSN: 00222623; DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5b00599.

Posizione rilievo: -

IF = 6.8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 93

13. Pisani, L., Farina, R., Catto, M., Iacobazzi, R., Nicolotti, O., Cellamare, S., Mangiatordi, G. F., Denora, N., SotoOtero, R., Siragusa, L., Altomare, C., Carotti, A. Exploring Basic Tail Modifications of Coumarin-based Dual Acetylcholinesterase-Monoamine Oxidase B Inhibitors: Identification of Water-soluble, Brain-permeant Neuroprotective Multitarget Agents (2016) Journal of Medicinal Chemistry, 59 (14), pp. 6791-6806. ISSN: 00222623; DOI: 10.1021/acs.jmedchem.6b00562.

Posizione rilievo: -

IF = 6.8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 81

14. Mangiatordi G.F., Trisciuzzi D., Alberga D., Denora N., Iacobazzi R.M., Gadaleta D., Catto M., *Nicolotti O. Novel chemotypes targeting tubulin at the Colchicine binding site and unbiassing P-glycoprotein (2017) European Journal of Medicinal Chemistry, 139, pp. 792-803.

ISSN: 02235234; DOI: 10.1016/j.ejmech.2017.07.037

Posizione rilievo: Autore di riferimento e ultimo nome

IF = 6.8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 37

15. Mangiatordi, G. F., Alberga, D. Pisani, L., Gadaleta, D., Trisciuzzi, D., Farina, R., Carotti, A., Lattanzi, G., Catto, M., *Nicolotti, O.

A rational approach to elucidate human monoamine oxidase molecular selectivity of coumarin-based inhibitors (2017) *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 101, pp. 90-99.

ISSN: 09280987; DOI: 10.1016/j.ejps.2017.02.008

Posizione rilievo: Autore di riferimento e ultimo autore

IF = 4.6

Q1 (Pharmacology and Pharmacy)

Citazioni = 30

16. Alberga D., Trisciuzzi D., Montaruli M., Leonetti, F., Mangiatordi G. F., *Nicolotti O.

A new approach for drug target and bioactivity prediction: the Multi-fingerprint Similarity Search algorithm (MuSSeL)

(2019) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 59(1), pp. 586-596

ISSN: 15499596; DOI: 10.1021/acs.jcim.8b00698

Posizione rilievo: Autore di riferimento e ultimo autore

IF = 5.6

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 61

17. Tondo A. R., Caputo L., Mangiatordi G. F., Monaci L., Lentini G., Logrieco A. F., Montaruli M., *Nicolotti O., Quintieri L.

Structure-based identification and design of ACE-inhibitory peptides from whey proteins (2020) *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 68 (2), pp. 541-548.

ISSN: 0021-8561; DOI: 10.1021/acs.jafc.9b06237

Posizione rilievo: Co-autore di riferimento

IF = 5.7

Q1 (Chemistry, Applied)

Citazioni = 21

18. Alberga D., Gambacorta N., Trisciuzzi D., Ciriaco F., Amoroso N., *Nicolotti O.
De novo drug design of targeted chemical libraries based on artificial intelligence and pair based multiobjective optimization

(2020) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 60 (10), pp. 4582-4593

ISSN: 15499596; DOI: 10.1021/acs.jcim.0c00517

Posizione rilievo: Autore di riferimento e ultimo autore

IF = 5.6

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 56

19. Ciriaco F., Gambacorta N., Alberga D., Nicolotti O.*

Quantitative polypharmacology profiling based on a multifingerprint similarity predictive approach (2021) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 61(10), pp. 4868–4876.

ISSN: 15499596; DOI: 10.1021/acs.jcim.1c00498

Posizione rilievo: Autore di riferimento e ultimo autore

IF = 5.6

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 20

20. Trisciuzzi D., Siragusa L., Baroni M., Cruciani G., Nicolotti O.
An Integrated Machine Learning Model To Spot Peptide Binding Pockets in 3D Protein Screening (2022) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 62 (24), pp. 6812-6824. ISSN: 15499596; DOI: 10.1021/acs.jcim.2c00583
Posizione rilievo: Ultimo autore
IF = 5.6 Q1 (Chemistry, Medicinal)
Citazioni = 10
21. Trisciuzzi D., Siragusa L., Baroni M., Autiero I., Nicolotti O.*, Cruciani G.
Getting insights into structural and energetic properties of reciprocal peptide-protein interactions (2022) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 62 (4), pp. 1113-1125.
ISSN: 15499596; DOI: 10.1021/acs.jcim.1c01343
Posizione rilievo: Co-autore di riferimento
IF = 5.6 Q1 (Chemistry, Medicinal)
Citazioni = 9
22. Togo M.V., Mastrolorito F., Ciriaco F., Trisciuzzi D., Tondo A.R., Gambacorta N., Bellantuono L., Monaco A., Leonetti F., Bellotti R., Altomare C. D., Amoroso N., Nicolotti O.*
TIRESIA: an eXplainable Artificial Intelligence Platform for Predicting Developmental Toxicity (2023) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 63 (1), pp. 56-66.
ISSN: 15499596; DOI: 10.1021/acs.jcim.2c01126.
Posizione rilievo: Co-autore di riferimento e ultimo nome
IF = 5.6 Q1 (Chemistry, Medicinal)
Citazioni = 14
23. Gambacorta N., Gasperi V., Guzzo T., Di Leva F.S., Ciriaco F., Sánchez C., Tullio V., Rozzi D., Marinelli L., Topai A., Nicolotti O.*, Maccarrone M.
Exploring the 1,3-Benzoxazine Chemotype for Cannabinoid Receptor 2 as a Promising Anti-Cancer Therapeutic (2023) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 259, art. no. 115647.
ISSN: 0223-5234; DOI: 10.1016/j.ejmech.2023.115647
Posizione rilievo: Co-autore di riferimento
IF = 6.7 Q1 (Chemistry, Medicinal)
Citazioni = 5
24. Gambacorta N., Ciriaco F., Amoroso N., Altomare C.D., Bajorath J., Nicolotti O.*
CIRCE: Web-Based Platform for the Prediction of Cannabinoid Receptor Ligands Using Explainable Machine Learning
(2023) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 63 (18), pp. 5916-5926.

ISSN: 15499596; DOI: 10.1021/acs.jcim.3c00914.

Posizione rilievo: Co-autore di riferimento e ultimo nome

IF = 5.6

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 9

25. Mastrolorito F., Togo M.V., Gambacorta N., Trisciuzzi D., Giannuzzi V., Bonifazi F., Liantonio A., Imbrici P., De

Luca A., Altomare C. D., Ciriaco F., Amoroso N., Nicolotti O.*

TISBE: a public web platform for the consensus-based explainable prediction of developmental toxicity (2024) Chemical Research in Toxicology, 37 (2), pp. 323-339.

ISSN: 0893-228X; DOI: 10.1021/acs.chemrestox.3c00310

Posizione rilievo: Co-autore di riferimento e ultimo autore

IF = 3.7

Q2 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni = 2

Le 25 pubblicazioni presentate per la valutazione sono relative al periodo 2002-2024 e sono di livello editoriale complessivamente eccellente collocandosi 24/25 nel primo quartile e 1/25 nel secondo quartile (Journal Citation Reports – WOS). Dall'analisi di ciascuna delle 25 pubblicazioni selezionate, pienamente congruenti con il SSD relativo al bando di concorso, si rileva che queste hanno un eccellente livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. Per quanto attiene alla loro collocazione editoriale in base ad analisi della subject category di WOS 23/25 sono classificate da WOS nella categoria Chemistry, Medicinal e 2/25 sono classificate in categorie diverse (Applied Chemistry, Pharmacology and Pharmacy). Il candidato ha una posizione preminente in 18 pubblicazioni sulle 25 selezionate. Nel dettaglio è autore unico di riferimento in 6 pubblicazioni; è co-autore di riferimento in 7 pubblicazioni; è primo autore in 6 pubblicazioni e ultimo autore in 9 pubblicazioni.

Organizzazione o partecipazione come relatore a convegni

Il candidato è stato membro di Comitato organizzatore o scientifico di due Meeting internazionali e di uno nazionale. Ha partecipato in qualità di relatore a 12 congressi nazionali ed internazionali, riportando di aver tenuto 3 plenary, 7 keynotes, 2 workshops e 11 comunicazioni orali pienamente congruenti con il settore CHIM/08.

Premi o riconoscimenti.

Ha ottenuto due Cover per due sue pubblicazioni su rivista.

Attività Editoriale

Membro dello Editorial board di 3 riviste di cui una parzialmente congruente con la categoria Medicinal Chemistry. Editor di 1 rivista e di 1 libro, Associated Editor di 2 riviste e guest editor di 1 issue e co-guest editor di 3 issues. Editore di un libro.

Collaborazioni a livello nazionale o internazionale

Le sue attività sono caratterizzate da numerose collaborazioni a livello nazionale o internazionale come rilevabile dalle pubblicazioni in comune con coautori affiliati sia ad istituzioni estere che ad istituzioni italiane.

Responsabilità scientifica per progetti di ricerca internazionali e nazionali, ammessi al finanziamento sulla base di bandi competitivi che prevedano la revisione tra pari

Il candidato ha ottenuto come responsabile scientifico o responsabile di unità un significativo numero (7) di finanziamenti competitivi nazionali (PNRR, Min Salute, SEEDS, PON, FIRB, Giovani ricercatori), nonché di 3 piccoli finanziamenti di Ateneo oltre a raccogliere alcuni fondi da soggetti privati con diverse convenzioni.

Trasferimento Tecnologico/Attività Brevettuale

Il candidato è co-inventore di 1 brevetto internazionale PCT.

Si riportano, quindi, i giudizi individuali:

Commissario Prof. Roberto Di Santo

Il Prof. Orazio Nicolotti è attualmente professore ordinario nel settore scientifico disciplinare CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica), presso l'Università di Bari "Aldo Moro" Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco. La sua produzione scientifica risulta complessivamente di ottimo livello, caratterizzata da parametri bibliometrici ottimi, continua nel tempo salvo brevi discontinuità in fase iniziale e mostra la crescita progressiva del candidato nella gestione dei progetti di ricerca. L'attività scientifica è incentrata sulla chimica farmaceutica computazionale. In particolare, il candidato si interessa di studio delle relazioni struttura-attività e progettazione molecolare di inibitori selettivi di proteine d'interesse terapeutico, sviluppo di piattaforme digitali, basate su approcci di intelligenza artificiale per l'identificazione di nuovi composti bioattivi e la predizione di endpoint tossicologici, nonché dello sviluppo di nuovi metodi di analisi computazionale per la progettazione razionale di nuovi farmaci. Tali ricerche sono in totale coerenza con le tematiche del Settore Scientifico Disciplinare CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica). Le 25 pubblicazioni mostrano complessivamente un'eccellente collocazione editoriale oltre che un eccellente livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. Esse sono pienamente congruenti con il SSD relativo al bando di concorso. Il candidato ha una posizione di preminenza in 18 delle 25 pubblicazioni selezionate. E' stato responsabile scientifico o responsabile di unità di 7 progetti ammessi al finanziamento sulla base di bandi competitivi che prevedono la revisione tra pari, mostrando un'ottima capacità di coordinamento di attività di ricerca. L'attività di terza missione è testimoniata da un brevetto di cui è co-autore. L'attività didattica svolta si colloca per la maggior parte nell'ambito di insegnamenti del Settore Scientifico Disciplinare CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica

Farmaceutica) ed è ampia e continua. Altra attività didattica è da collocare in SSD non CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (ex CHIM/08). Si è occupato della formazione di 16 tesisti ed è stato tutor di 10 studenti di dottorato. Per più di un anno (2020-21) è stato coordinatore del Consiglio dei Corsi di Studio della Classe L29 (Tecniche Erboristiche, Scienze tecniche erboristiche e Prodotti per la salute) presso il Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco, Università di Bari 'Aldo Moro' ed ha svolto altre attività istituzionali quali la partecipazione a Collegi di Dottorati di ricerca in qualità di Membro. In conclusione, il giudizio sull'attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione è quindi complessivamente ottimo.

Commissario Prof. Marco Macchia

Il Prof. Orazio Nicolotti ha un'ottima esperienza di ricerca e ha partecipato come responsabile scientifico a 7 progetti di ricerca finanziati su base competitiva. Dal curriculum del candidato emergono un'attività di ricerca e una produzione scientifica complessivamente di ottimo livello, totalmente congruenti con la declaratoria del SSD CHIM/08, continue nel tempo salvo brevi discontinuità in fase iniziale e caratterizzate da un'ottima maturità scientifica ed indici bibliometrici di rilievo. Ai fini della presente valutazione, presenta 25 pubblicazioni complessivamente di livello editoriale, originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza eccellenti. Le pubblicazioni sono tutte pienamente coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08, sono collocate in preponderanza nella categoria Medicinal Chemistry e trattano di diversi approcci della chimica farmaceutica computazionale, volti alla progettazione razionale di farmaci e la predizione di endpoint tossicologici. Il candidato ha un ruolo di autore preminente in 18 dei 25 articoli presentati, di cui 13 come autore di riferimento, 9 come ultimo autore e 6 come primo. L'attività di terza missione del candidato è documentata da un brevetto internazionale. Le attività svolte dal candidato in incarichi istituzionali, organizzativi e di servizio presso l'Università di Bari appaiono complessivamente buone. L'attività didattica appare intensa e svolta con continuità a partire dal 2007 in insegnamenti per la maggior parte pienamente congruenti con il SSD CHIM/08 e in misura minore in altre discipline. Il giudizio complessivo sull'attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione del Prof. Nicolotti è ottimo.

Commissario Prof. Vincenzo Summa

Il Prof. Orazio Nicolotti attualmente ricopre la posizione di professore ordinario nel settore scientifico-disciplinare CHIM/08 Chimica Farmaceutica presso il Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco, Università degli Studi di Bari 'Aldo Moro'. Il candidato presenta una produzione scientifica complessivamente di ottimo livello e continua, tranne nel periodo iniziale della carriera. L'attività scientifica del candidato è principalmente incentrata sullo studio delle relazioni struttura-attività e progettazione molecolare di inibitori selettivi di proteine d'interesse terapeutico quali acetilcolinesterasi, MAO, aromatasi, metalloproteinasie di matrice, tubulina, P-gp, serino-proteasi e di ligandi del sistema endocannabinoide. Più recentemente si interessa allo sviluppo di piattaforme digitali, basate su approcci di intelligenza

artificiale; sviluppo di nuovi metodi di analisi computazionale, principalmente basati su algoritmi non-deterministici; derivazione di modelli QSAR predittivi; disegno di librerie combinatoriali, analisi di similarità/diversità molecolare, sviluppo di algoritmi evolutivisti, bioinformatica, tecniche 2D- e 3D-QSAR, *de novo* design, metodi di simulazione basati su docking e dinamica molecolare, metodi di intelligenza artificiale spiegabile, tecniche di statistica multivariata e non-deterministica. Tali ricerche sono perfettamente allineate con l'SSD CHIM/08. Le 25 pubblicazioni presentate sono di livello complessivamente eccellente sia da un punto di vista della collocazione editoriale che per originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. Ha svolto ruoli di coordinamento di 7 progetti finanziati, mostrando competenze ottime come responsabile di unità. Ha inoltre avuto finanziamenti da privati ed è co-autore di un brevetto internazionale. La sua attività didattica è vasta e continua, comprendendo la formazione di sedici tesisti e dieci dottorandi oltre a due tesisti di Master di II livello. Per più di un anno ha presieduto il Consiglio dei Corsi di Studio della Classe L29 (Tecniche Erboristiche, Scienze tecniche erboristiche e Prodotti per la salute) presso il Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco, Università degli Studi di Bari 'Aldo Moro' ed ha svolto altre attività istituzionali quali la partecipazione a Collegi di Dottorati di ricerca. In sintesi, il giudizio complessivo sull'attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione del Prof. Nicolotti è ottimo.

Giudizio collegiale:

Il Prof. Orazio Nicolotti è attualmente professore ordinario nel settore scientifico-disciplinare CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica), presso il Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco dell'Università degli Studi Bari "Aldo Moro". Il Prof. Nicolotti ha una produzione scientifica complessivamente di ottimo livello, pienamente coerente con le tematiche del settore CHEM-07/A e continua fatte salve alcune discontinuità iniziali. Le sue ricerche si concentrano sugli aspetti computazionali della chimica farmaceutica, con particolare riferimento alla progettazione di inibitori selettivi di proteine d'interesse terapeutico e allo studio delle SAR e QSAR; sviluppo di piattaforme digitali, basate su approcci di intelligenza artificiale; sviluppo di nuovi metodi di analisi computazionale basati su algoritmi non-deterministici; disegno di librerie combinatoriali, analisi di similarità/diversità molecolare, sviluppo di algoritmi evolutivisti, bioinformatica, tecniche 2D- e 3D-QSAR, *de novo* design, metodi di simulazione basati su docking e dinamica molecolare, metodi di intelligenza artificiale spiegabile, tecniche di statistica multivariata e non-deterministica. Le 25 pubblicazioni presentate sono pienamente coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08 e di livello complessivamente eccellente sia da un punto di vista della collocazione editoriale che per originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. Il candidato ha una posizione preminente in 18 pubblicazioni sulle 25 selezionate. Ha ricoperto il ruolo di responsabile di unità di ricerca in sette progetti ammessi al finanziamento sulla base di bandi competitivi nazionali ed internazionali che prevedono la revisione tra pari oltre ad avere finanziamenti da privati, ed è co-

autore di un brevetto internazionale. L'attività didattica del Prof. Nicolotti è ampia e continua, per la maggior parte svolta nell'ambito degli insegnamenti del settore CHEM-07/A e in parte in insegnamenti appartenenti ad altri SSD. Ha contribuito significativamente alla formazione di numerosi tesisti e dottorandi. Ha ricoperto per più di un anno il ruolo di coordinatore del Consiglio di Classe L-29 presso il Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco dell'Università degli Studi di Bari 'Aldo Moro'. Il Prof. Nicolotti ha svolto anche altre attività istituzionali, inclusa la partecipazione al Collegio di Dottorato di Ricerca in qualità di Membro. In conclusione, il giudizio sull'attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione del Prof. Orazio Nicolotti è complessivamente ottimo.

3. CANDIDATO: Prof. Dante ROTILI

Note generali

Dalla documentazione presentata si evince che:

Notizie biografiche

Carriera

Il candidato ha conseguito la laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" e il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Farmaceutiche nella medesima Università. Quindi è stato borsista (6 mesi) ed assegnista (1 anno) nello stesso Ateneo e successivamente Postdoctoral Research Associate presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Oxford (UK) (15 mesi). Infine, è stato assegnista di ricerca presso l'Università La Sapienza per più di un anno.

Ha preso servizio nel 2011 come Ricercatore Universitario del SSD CHIM/08 - Chimica Farmaceutica e quindi come Professore di II fascia a partire dal 2020, presso il Dipartimento Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza".

Nel 2017 ha conseguito l'abilitazione a Professore di I fascia per il SSD CHIM/08 Chimica Farmaceutica.

Attività didattica

A partire dall'A.A. 2013-2014 ha svolto una continua e intensa attività didattica nell'ambito di diversi insegnamenti, tutti congruenti con il SSD CHIM/08 nell'ambito delle discipline chimico-farmaceutiche presso L'Università "La Sapienza". Ha svolto, inoltre, attività di docenza e seminariale in seno alla Scuola di Specializzazione in Medicina Nucleare dell'Università Cattolica del Sacro Cuore. Dal 2007 ha seguito i progetti di tesi di studenti iscritti a diversi corsi di studio relativi alla classe LM-13 dell'Università La Sapienza, nonché i progetti di tesi di dottorandi afferenti al corso di Dottorato in Scienze del Farmaceutiche dello stesso Ateneo.

Ruoli Coordinamento

E' stato membro del collegio dei docenti del Dottorato di Ricerca in "Scienze Farmaceutiche" (2019-2022) e dal 2022 è membro del Collegio dei Docenti del Corso di Dottorato in "Molecular design and characterization for the promotion of health and well-being: from drug to food". Dal 2022 è referente del corso di laurea in Molecular biology, Medicinal Chemistry and Computer Science for Pharmaceutical Applications (in lingua Inglese), presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".

Attività e linee di ricerca

Il candidato svolge attività di ricerca prevalentemente focalizzata sulla progettazione, sintesi e validazione biologica di SME di natura eterociclica, nucleosidica e peptidomimetica come modulatori di target epigenetici, come agenti antitumorali e come antiinfettivi. Si interessa di sviluppo di sonde chemoproteomiche per la caratterizzazione funzionale di target epigenetici ed è coinvolto nello sviluppo di radiotraccianti per la chirurgia radio-guidata dei tumori e di enhancers di protonterapia e Boron Neutron Capture Therapy (BNCT). Si occupa infine di spettrometria di massa nativa (nMS) e delle applicazioni di questa tecnica allo studio delle interazioni proteina-proteina, proteina-acido nucleico e proteina-ligando.

Produzione scientifica complessiva

Dal curriculum del candidato emergono un'attività di ricerca e una produzione scientifica (2003-2024) complessivamente di livello eccellente, continue nel tempo e caratterizzate da una piena maturità scientifica. L'elevato impatto della sua produzione scientifica, che risulta pienamente coerente con la declaratoria del SSD CHIM/08, si evince dai parametri analizzati e consiste di 176 pubblicazioni, con un valore dell'indice di Hirsch = 47 (Scopus), e con un numero di citazioni totali pari a 6383 (Scopus); IF totale 930,521 e IF medio di 5,287; citazioni medie 36,267. Il candidato è inoltre co-autore di 4 capitoli di libri.

LAVORI SCIENTIFICI PRESENTATI:

1) Pannek M, Alhalabi Z, Tomaselli D, Menna M, Fiorentino F, Robaa D, Weyand M, Puhlmann M, Tomassi S, Barreca F, Tafani M, Zaganjor E, Haigis MC, Sippl W, Rotili D,* Mai A, Steegborn C. Specific Inhibitors of Mitochondrial Deacylase Sirtuin 4 Endowed with Cellular Activity. J. Med. Chem. 2024 Feb 8;67(3):1843-1860. doi: 10.1021/acs.jmedchem.3c01496.

Posizione rilievo: *co-corresponding author

IF 6,8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 2

2) Fiorentino F, Fabbri E, Raucci A, Noce B, Fioravanti R, Valente S, Paolini C, De Maria R, Steinkühler C, Gallinari P, Rotili D,* Mai A. Uracil- and Pyridine-Containing HDAC Inhibitors Displayed Cytotoxicity in Colorectal and Glioblastoma

Cancer Stem Cells. ChemMedChem. 2024 Mar 26:e202300655. doi: 10.1002/cmdc.202300655.

Posizione rilievo: *co-corresponding author

IF 3,6 Q2 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 0

3) Fiorentino F, Sementilli S, Menna M, Turrise F, Tomassi S, Pellegrini FR, Iuzzolino A, D'Acunzo F, Feoli A, Wapenaar H, Taraglio S, Frascchetti C, Del Bufalo D, Sbardella G, Dekker FJ, Paiardini A, Trisciuglio D, Mai A, Rotili D.* First-in-Class Selective Inhibitors of the Lysine Acetyltransferase KAT8. J. Med. Chem. 2023 May 25;66(10):6591-6616. doi: 10.1021/acs.jmedchem.2c01937.

Posizione rilievo: *co-corresponding author, ultimo autore

IF 6,8 Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 3

4) Fiorentino F, Nocentini A, Rotili D,* Supuran CT, Mai A. Antihistamines, phenothiazine-based antipsychotics, and tricyclic antidepressants potently activate pharmacologically relevant human carbonic anhydrase isoforms II and VII. J. Enzyme Inhib. Med. Chem. 2023 Dec;38(1):2188147. doi: 10.1080/14756366.2023.2188147.

Posizione rilievo: *co-corresponding author

IF 5,6 Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 4

5) Zhou J, Horton JR, Menna M, Fiorentino F, Ren R, Yu D, Hajian T, Vedadi M, Mazzocanti G, Ciogli A, Weinhold E, Hüben M, Blumenthal RM, Zhang X, Mai A, Rotili D,* Cheng X. Systematic Design of Adenosine Analogs as Inhibitors of a *Clostridioides difficile*-Specific DNA Adenine Methyltransferase Required for Normal Sporulation and Persistence. J. Med. Chem. 2023 Jan 12;66(1):934-950. doi: 10.1021/acs.jmedchem.2c01789.

Posizione rilievo: *co-corresponding author

IF 6,8 Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 3

6) Menna M, Fiorentino F, Marrocco B, Lucidi A, Tomassi S, Cilli D, Romanenghi M, Cassandri M, Pomella S, Pezzella M, Del Bufalo D, Zeya Ansari MS, Tomašević N, Mladenović M, Viviano M, Sbardella G, Rota R, Trisciuglio D, Minucci S, Mattevi A, Rotili D,* Mai A. Novel non-covalent LSD1 inhibitors endowed with anticancer effects in leukemia and solid tumor cellular models. Eur. J. Med. Chem. 2022 Jul 5;237:114410. doi: 10.1016/j.ejmech.2022.114410.

Posizione rilievo: *co-corresponding author

IF 6,0 Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 15

7) Nowak RP, Tumber A, Hendrix E, Ansari MSZ, Sabatino M, Antonini L, Andrijes R, Salah E, Mautone N, Pellegrini FR, Simelis K, Kawamura A, Johansson C, Passeri D, Pellicciari R, Ciogli A, Del Bufalo D, Ragno R, Coleman ML, Trisciuglio D, Mai A, Oppermann U, Schofield CJ, Rotili D.* First-in-Class Inhibitors of the Ribosomal Oxygenase MINA53. *J. Med. Chem.* 2021 Dec 9;64(23):17031-17050. doi: 10.1021/acs.jmedchem.1c00605.

Posizione rilievo: *co-corresponding author e ultimo autore

IF 6,8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 8

8) Fiorentino F, De Angelis M, Menna M, Rovere A, Caccuri AM, D'Acunzo F, Palamara AT, Nencioni L, Rotili D,* Mai A. Anti-influenza A virus activity and structure-activity relationship of a series of nitrobenzoxadiazole derivatives. *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* 2021 Dec;36(1):2128-2138. doi: 10.1080/14756366.2021.1982932.

Posizione rilievo: *co-corresponding author

IF 5,6

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 5

9) Tomassi S, Pfahler J, Mautone N, Rovere A, Esposito C, Passeri D, Pellicciari R, Novellino E, Pannek M, Steegborn C, Paiardini A, Mai A, Rotili D.* From PARP1 to TNKS2 Inhibition: A Structure-Based Approach. *ACS Med. Chem. Lett.* 2020 Feb 3;11(5):862-868. doi: 10.1021/acsmchemlett.9b00654.

Posizione rilievo: *co-corresponding author e ultimo autore

IF 3,5

Q2 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 8

10) Monaldi D, Rotili D,* Lancelot J, Marek M, Wössner N, Lucidi A, Tomaselli D, Ramos-Morales E, Romier C, Pierce RJ, Mai A, Jung M. Structure-Reactivity Relationships on Substrates and Inhibitors of the Lysine Deacylase Sirtuin 2 from *Schistosoma mansoni* (SmSirt2). *J. Med. Chem.* 2019 Oct 10;62(19):8733-8759. doi: 10.1021/acs.jmedchem.9b00638.

Posizione rilievo: *co-corresponding author

IF 6,8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 19

11) Nocentini A, Lucidi A, Perut F, Massa A, Tomaselli D, Gratteri P, Baldini N, Rotili D,* Mai A, Supuran, CT. α,γ -Diketocarboxylic Acids and Their Esters Act as Carbonic Anhydrase IX and XII Selective Inhibitors. *ACS Med. Chem. Lett.* 2019;10:661-665. doi: 10.1021/acsmchemlett.9b00023

Posizione rilievo: *co-corresponding author

IF 3,5

Q2 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 18

12) Nawrozkij M, Forgione M, Yablokov AS, Lucidi A, Tomaselli D, Patsilnakos A, Panella C, Hailu GS, Kirillov IA, Badia R, Riveira Muñoz E, Crespan E, Armijos-Rivera JJ, Cirilli R, Ragno R, Este JA, Maga G, Mai A, Rotili D.* Effect of α -Methoxy Substitution on the anti-HIV Activity of Dihydropyrimidin-4(3H)-ones. J. Med. Chem. 2019;62:604-621. doi: 10.1021/acs.jmedchem.8b01238

Posizione rilievo: *co-corresponding author e ultimo autore

IF 6,8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 14

13) Bouchut A, Rotili D,* Pierrot C, Valente S, Lafitte S, Schultz J, Hoglund U, Mazzone R, Lucidi A, Fabrizi G, Pechalrieu D, Arimondo PB, Skinner-Adams TS, Chua MJ, Andrews KT, Mai A, Khalife J. Identification of novel quinazoline derivatives as potent antiplasmodial agents. Eur. J. Med. Chem. 2019;161:277-291. doi: 10.1016/j.ejmech.2018.10.041

Posizione rilievo: *co-primo autore

IF 6,0

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 46

14) Moniot S, Forgione M, Lucidi A, Hailu GS, Nebbioso A, Carafa V, Baratta F, Altucci L, Giacchè N, Passeri D, Pellicciari R, Mai A, Steegborn C, Rotili D.* Development of 1,2,4-Oxadiazoles as Potent and Selective Inhibitors of the Human Deacetylase Sirtuin 2: Structure-Activity Relationship, X-Ray Crystal Structure and Anticancer Activity. J. Med. Chem. 2017;60:2344-2360. doi: 10.1021/acs.jmedchem.6b01609.

Posizione rilievo: *co-corresponding author e ultimo autore

IF 6,8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 78

15) Rotili D, De Luca A, Tarantino D, Pezzola S, Forgione M, Morozzo Della Rocca B, Falconi M, Mai A, Caccuri AM. Synthesis and structure-activity relationship of new cytotoxic agents targeting human glutathione-S-transferases. Eur. J. Med. Chem. 2015;89:156-171. doi: 10.1016/j.ejmech.2014.10.033.

Posizione rilievo: primo autore

IF 6,0

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 31

16) Rotili D, Tarantino D, Nawrozkij MB, Babushkin AS, Botta G, Marrocco B, Cirilli R, Menta S, Badia R, Crespan E, Ballante F, Ragno R, Esté JA, Maga G, Mai A. Exploring the role of 2-chloro-6-fluoro substitution in 2-alkylthio-6-benzyl-5-alkylpyrimidin-4(3H)-ones: effects in HIV-1-infected cells and in HIV-1 reverse transcriptase enzymes. J. Med. Chem. 2014;57:5212-5225. doi: 10.1021/jm500284x.

Posizione rilievo: primo autore

IF 6,8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 18

17) Rotili D,* Tomassi S, Conte M, Benedetti R, Tortorici M, Ciossani G, Valente S, Marrocco B, Labella D, Novellino E, Mattevi A, Altucci L, Tumber A, Yapp C, King ON, Hopkinson RJ, Kawamura A, Schofield CJ, Mai A. Pan-histone demethylase inhibitors simultaneously targeting jumonji C and lysine-specific demethylases display high anticancer activities. *J. Med. Chem.* 2014;57:42-55. doi: 10.1021/jm4012802.

Posizione rilievo: co-primo autore

IF 6,8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 94

18) Carradori S, Rotili D,* De Monte C, Lenoci A, D'Ascenzio M, Rodriguez V, Filetici P, Miceli M, Nebbioso A, Altucci L, Secci D, Mai A. Evaluation of a large library of (thiazol-2-yl)hydrazones and analogues as histone acetyltransferase inhibitors: enzyme and cellular studies. *Eur. J. Med. Chem.* 2014;80:569-578. doi: 10.1016/j.ejmech.2014.04.042.

Posizione rilievo: co-primo autore

IF 6,0

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 47

19) Rotili D, Tarantino D, Nebbioso A, Paolini C, Huidobro C, Lara E, Mellini P, Lenoci A, Pezzi R, Botta G, Lahtela-Kakkonen M, Poso A, Steinkühler C, Gallinari P, De Maria R, Fraga M, Esteller M, Altucci L, Mai A. Discovery of salermide-related sirtuin inhibitors: binding mode studies and antiproliferative effects in cancer cells including cancer stem cells. *J. Med. Chem.* 2012;55:10937-10947. doi: 10.1021/jm3011614.

Posizione rilievo: primo autore

IF 6,8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 77

20) Rotili D, Tarantino D, Carafa V, Paolini C, Schemies J, Jung M, Botta G, Di Maro S, Novellino E, Steinkühler C, De Maria R, Gallinari P, Altucci L, Mai A. Benzodeazaflavins as sirtuin inhibitors with antiproliferative properties in cancer stem cells. *J. Med. Chem.* 2012;55:8193-8197. doi:10.1021/jm301115r

Posizione rilievo: primo autore

IF 6,8

Q1 (Chemistry, Medicinal)

Citazioni 30

21) Rotili D, Samuele A, Tarantino D, Ragno R, Musmuca I, Ballante F, Botta G, Morera L, Pierini M, Cirilli R, Nawrozkij MB, Gonzalez E, Clotet B, Artico M, Esté JA, Maga G, Mai A. 2-(Alkyl/aryl)amino-6-benzylpyrimidin-4(3H)-ones as inhibitors of wild-type and mutant HIV-1: enantioselectivity studies. *J. Med. Chem.* 2012;55:3558-3562. doi: 10.1021/jm201308v.

Posizione rilievo: co-primo autore

IF 6,8 Q1 (Chemistry, Medicinal)
Citazioni 29

22) Rotili D, Tarantino D, Artico M, Nawrozkij MB, Gonzalez-Ortega E, Clotet B, Samuele A, Esté JA, Maga G, Mai A. Diarylpyrimidine-dihydrobenzyloxypyrimidine hybrids: new, wide-spectrum anti-HIV-1 agents active at (sub)-nanomolar level. J. Med. Chem. 2011;54:3091-3096. doi: 10.1021/jm101626c.

Posizione rilievo: primo autore

IF 6,8 Q1 (Chemistry, Medicinal)
Citazioni 47

23) Rotili D, Carafa V, Tarantino D, Botta G, Nebbioso A, Altucci L, Mai A. Simplification of the tetracyclic SIRT1-selective inhibitor MC2141: Coumarin- and pyrimidine-based SIRT1/2 inhibitors with different selectivity profile. Bioorg. Med. Chem. 2011;19:3659-3668. doi: 10.1016/j.bmc.2011.01.025.

Posizione rilievo: primo autore

IF 3,3 Q2 (Chemistry, Medicinal)
Citazioni 27

24) Rotili D, Tarantino D, Carafa V, Lara E, Meade S, Botta G, Nebbioso A, Schemies J, Jung M, Kazantsev AG, Esteller M, Fraga MF, Altucci L, Mai A. Identification of tri- and tetracyclic pyrimidinediones as sirtuin inhibitors. ChemMedChem 2010;5:674-677. doi: 10.1002/cmdc.201000030.

Posizione rilievo: primo autore

IF 3,6 Q2 (Chemistry, Medicinal)
Citazioni 46

25) Nawrozkij MB, Rotili D,* Tarantino D, Botta G, Eremiychuk AS, Musmuca I, Ragno R, Samuele A, Zanolì S, Armand-Ugón M, Clotet-Codina I, Novakov IA, Orlinson BS, Maga G, Esté JA, Artico M, Mai A. 5-Alkyl-6-benzyl-2-(2-oxo-2-phenylethylsulfanyl)pyrimidin-4(3H)-ones, a Series of Anti-HIV-1 Agents of the Dihydro-alkoxy-benzyl-oxypyrimidine Family with Peculiar Structure-Activity Relationship Profile. J. Med. Chem. 2008;51:4641-4652. doi: 10.1021/jm800340w

Posizione rilievo: co-primo autore

IF 6,8 Q1 (Chemistry, Medicinal)
Citazioni 54

Le 25 pubblicazioni presentate per la valutazione, comprese nel periodo 2008-2024, sono di livello editoriale complessivamente eccellente, di cui 20/25 nel primo quartile e 5/25 nel secondo quartile (Journal Citation Reports – WOS). Dall'analisi di ciascuna delle 25 pubblicazioni selezionate si rileva che queste hanno un eccellente livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. Le 25 pubblicazioni sono pienamente congruenti con il SSD relativo al bando di concorso e sono tutte classificate da WOS come categoria Chemistry, Medicinal. Il candidato ha

una posizione preminente in tutte le 25 pubblicazioni presentate. Nel dettaglio è primo autore in 7 pubblicazioni e uno dei due primi autori (co-first) in 5 pubblicazioni; è co-autore di riferimento in 13 pubblicazioni; è ultimo autore in 5 pubblicazioni.

Organizzazione o partecipazione come relatore a convegni

Il candidato è stato membro del Comitato scientifico di un Meeting internazionale organizzato a Roma (3rd Molecules Medicinal Chemistry Symposium: Shaping Medicinal Chemistry for the New Decade, 2022), ha partecipato in qualità di relatore su invito a 7 Meeting internazionali (3) e nazionali (4), tra i quali è rilevabile una Main Lecture.

Premi o riconoscimenti.

Per la sua attività scientifica ha ricevuto il Premio Farindustria 2011 e il Premio “Sapienza Ricerca 2011”. Una sua pubblicazione è riconosciuta da parte degli Editor-in-Chief della rivista Journal of Medicinal Chemistry come “Highly cited article of 2014” e ha ricevuto un Travel Grant per un congresso internazionale.

Attività Editoriale

È membro dell’Editorial Board di 4 riviste, alcune congruenti con la categoria Medicinal Chemistry, altre parzialmente congruenti; Review Editor (3 riviste) e Guest Editor (2 Special Issues).

Collaborazioni a livello nazionale o internazionale

Le sue attività sono caratterizzate da collaborazioni a livello nazionale o internazionale come rilevabile dalle pubblicazioni e dai brevetti in comune con coautori internazionali (10 gruppi; 52 pubblicazioni e 2 brevetti) e nazionali (10 gruppi; 83 pubblicazioni e 4 brevetti) e dalla partecipazione al network di ricerca europeo COST.

Responsabilità scientifica per progetti di ricerca internazionali e nazionali, ammessi al finanziamento sulla base di bandi competitivi che prevedano la revisione tra pari

Il candidato ha ottenuto come responsabile scientifico o responsabile di unità un significativo numero (6) di finanziamenti competitivi nazionali (PNRR, PRIN, MISE, POR FESR, AIRC), nonché di 8 finanziamenti di Ateneo dei quali 3 con bando competitivo e revisione tra pari.

Trasferimento Tecnologico/Attività Brevettuale

In relazione all’attività di trasferimento tecnologico, si osserva un livello di attività brevettuale eccellente, essendo co-inventore di 7 brevetti dei quali 2 WO, 1 PCT, 2 USA e 2 nazionali.

Si riportano, quindi, i giudizi individuali:

Commissario Prof. Roberto Di Santo

Il Prof. Dante Rotili ha un'eccellente esperienza di ricerca e ha partecipato come responsabile scientifico a 6 progetti di ricerca nazionali finanziati su base competitiva. Dal curriculum del candidato emergono un'attività di ricerca e una produzione scientifica complessivamente di livello eccellente, pienamente congruente con il SSD CHIM/08, continue nel tempo, caratterizzate da un'eccellente maturità scientifica ed indici bibliometrici di assoluto rilievo.

Ai fini della presente valutazione, presenta 25 pubblicazioni complessivamente di livello editoriale eccellente. Mostrano un eccellente livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. Le pubblicazioni sono tutte pienamente coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08, sono collocate tutte nella categoria Medicinal Chemistry e trattano di diversi approcci della chimica farmaceutica quali progettazione, sintesi e validazione biologica di piccole molecole modulatori di target epigenetici, agenti antitumorali e antiinfettivi. Il candidato ha un ruolo di autore posizione preminente in tutte le 25 pubblicazioni presentate, in 13 come co-autore di riferimento, in 5 come ultimo autore e in 12 come primo. L'attività di terza missione del candidato è di eccellente livello, documentata da 7 brevetti. Il candidato ha conseguito il prestigioso "Premio Farindustria 2011". Le attività svolte dal candidato in incarichi istituzionali, organizzativi e di servizio presso l'Università di Roma "La Sapienza" appaiono buone per volume, continuità ed intensità. L'attività didattica come titolare di insegnamenti appare intensa e svolta con continuità a partire dal 2013 in insegnamenti pienamente congruenti con il SSD CHIM/08. In conclusione, il giudizio sull'attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione è quindi complessivamente eccellente.

Commissario Prof. Marco Macchia

Il Prof. Dante Rotili è attualmente professore associato nel settore scientifico disciplinare CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica), presso l'Università degli Studi "La Sapienza" (Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco). La sua produzione scientifica risulta complessivamente di eccellente livello, caratterizzata da parametri bibliometrici di assoluto rilievo, continua nel tempo e mostra la crescita progressiva del candidato nella gestione dei progetti di ricerca. Le linee di ricerca vertono su progettazione, sintesi e validazione biologica di SME di natura eterociclica, nucleosidica e peptidomimetica come modulatori di target epigenetici, come agenti antitumorali e come antiinfettivi; sviluppo di sonde chemoproteomiche per la caratterizzazione funzionale di target epigenetici; sviluppo di radiotraccianti per la chirurgia radio-guidata dei tumori e di enhancers di protonterapia e Boron Neutron Capture Therapy (BNCT); spettrometria di massa nativa (nMS) per lo studio delle interazioni proteina-proteina, proteina-acido nucleico e proteina-ligando. Tali ricerche sono in totale coerenza con le tematiche del Settore Scientifico Disciplinare CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica). Il candidato presenta 25 pubblicazioni complessivamente di livello editoriale eccellente, tutte pienamente

coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08. In esse è rilevabile un eccellente livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. Esse sono collocate tutte nella categoria Medicinal Chemistry e il candidato risulta essere in posizione preminente in tutte le 25 pubblicazioni presentate. Il Prof Rotili ha conseguito l'importante "Premio Farindustria 2011". E' co-autore di sette brevetti a testimonianza di un'attività di terza missione di eccellente livello ed è stato responsabile scientifico o responsabile di unità di 6 finanziamenti competitivi nazionali ed altri di Ateneo selezionati con bando competitivo basato su revisione tra pari, rilevando un'ottima capacità di coordinamento di attività di ricerca. L'attività didattica svolta si colloca pienamente nell'ambito di insegnamenti propri del Settore Scientifico Disciplinare CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica) ed è ampia e continua. Si è occupato della formazione di molti tesisti ed è stato tutor di studenti di dottorato. Dal 2022 è referente del CdS triennale Molecular biology, Medicinal Chemistry and Computer Science for Pharmaceutical Applications (L-29) presso il dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università "La Sapienza" ed è membro di Collegi di Dottorati di ricerca. In conclusione, il giudizio sull'attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione è quindi complessivamente eccellente.

Commissario Prof. Vincenzo Summa

Il Prof. Dante Rotili attualmente ricopre la posizione di professore associato nel settore scientifico-disciplinare CHIM/08 Chimica Farmaceutica presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza". Il candidato presenta un'eccellente produzione scientifica di notevole impatto e grande continuità, evidenziando una alta capacità di gestione e coordinamento di progetti di ricerca. Il candidato svolge attività di ricerca incentrate sulla progettazione, sintesi e validazione biologica di SME come modulatori di target epigenetici, utilizzabili come agenti antitumorali o antiinfettivi. Si occupa di spettrometria di massa nativa (nMS) e delle sue applicazioni per lo studio delle interazioni target-ligando e proteina-proteina. Sviluppa sonde chemoproteomiche per la caratterizzazione funzionale di target epigenetici ed è coinvolto nello sviluppo di radiotraccianti per la chirurgia radio-guidata dei tumori e di enhancers di protonterapia e BNCT. Tali ricerche sono perfettamente congruenti con l'SSD CHIM/08, come testimoniato anche dalle 25 pubblicazioni presentate dal Candidato. In queste si rileva un eccellente livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. Il candidato risulta essere in posizione preminente in tutte le 25 pubblicazioni presentate che sono complessivamente di livello editoriale eccellente e tutte collocate nella categoria Medicinal Chemistry. Co-autore di 7 brevetti, che testimoniano un eccellente livello di impegno nella terza missione, ha svolto ruoli di coordinamento di vari progetti finanziati, mostrando competenze ottime come responsabile di unità. Riceve il rilevante "Premio Farindustria 2011". La sua attività didattica è vasta e continua, comprendendo la formazione di numerosi tesisti e dottorandi. Il Prof. Rotili ha inoltre ricoperto ruoli istituzionali: dal 2022 è referente del CdS triennale appartenente alla classe L-29 "Molecular biology,

Medicinal Chemistry and Computer Science for Pharmaceutical Applications” presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell’Università di Roma “La Sapienza” e partecipa in qualità di Membro al Collegio dei Docenti del Corso di Dottorato internazionale in “Molecular design and characterization for the promotion of health and well-being: from drug to food”, e al Collegio dei Docenti del Corso di Dottorato in “Scienze Farmaceutiche”.

In sintesi, il giudizio complessivo sull’attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione del Prof. Rotili è eccellente.

Giudizio collegiale:

Il Prof. Dante ROTILI è attualmente professore associato nel settore scientifico-disciplinare CHIM/08 Chimica Farmaceutica, presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell’Università degli Studi Roma “La Sapienza”. Il Prof. Rotili ha un’eccellente produzione scientifica, continua e di impatto molto elevato, pienamente coerente con le tematiche del SSD CHIM/08.

Le sue ricerche si concentrano sugli aspetti di progettazione e sintetici di piccole entità molecolari di natura eterociclica ma anche peptidi come modulatori epigenetici, potenzialmente utili come agenti antitumorali e antimicrobici. Inoltre, applica la spettrometria di massa nativa (nMS) allo studio delle interazioni proteina-proteina, proteina-acido nucleico e proteina-ligando, oltre a sviluppare sonde chemoproteomiche per la caratterizzazione funzionale di target epigenetici, radiotraccianti per la chirurgia radio-guidata dei tumori e enhancers di protonterapia e Boron Neutron Capture Therapy (BNCT).

È co-autore di 5 brevetti internazionali e 2 nazionali, a testimonianza di un eccellente impegno nell’attività di terza missione. Il Prof Rotili ha coordinato da PI 6 progetti nazionali. Ha anche ricoperto il ruolo di responsabile di unità di ricerca in tre progetti di Ateneo assegnati mediante valutazione con revisione tra pari, mostrando ottime capacità di coordinamento di progetti di ricerca.

Le 25 pubblicazioni presentate dal candidato sono complessivamente di livello editoriale eccellente. Esse sono tutte pienamente coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08 e mostrano un eccellente livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. Le 25 pubblicazioni, sono collocate tutte nella categoria Medicinal Chemistry ed il candidato ha un ruolo di autore in posizione preminente in tutte le 25 pubblicazioni presentate.

La sua attività di ricerca è stata premiata con il conferimento del prestigioso “Premio Farindustria 2011”.

L’attività didattica del Prof. Rotili è ampia e continua, interamente svolta nell’ambito degli insegnamenti del settore CHIM/08. Ha contribuito significativamente alla formazione di numerosi tesisti e dottorandi.

Il Prof. Rotili ha svolto diverse attività istituzionali, inclusa la partecipazione a collegi di Dottorato di Ricerca e il ruolo di referente del CdS triennale in lingua Inglese “Molecular biology, Medicinal Chemistry and Computer Science for Pharmaceutical

Applications” (L-29) presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell’Università di Roma “La Sapienza”.

In conclusione, il giudizio complessivo sull’attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione del Prof. Dante Rotili è eccellente.

ALLEGATO B)

Giudizi comparativi della Commissione:

1. Candidata: Prof. Lucia GRUMETTO

La Prof.ssa Grumetto è professore associato nel settore scientifico-disciplinare CHIM/08 Chimica Farmaceutica presso l'Università degli Studi Napoli "Federico II" dal 2020 e ha conseguito l'abilitazione alla prima fascia nel settore CHIM/08 nel 2024. La sua produzione scientifica presenta alcune discontinuità nel periodo iniziale e assume continuità a partire dal 2011, ed è complessivamente di buon livello e congruente con le tematiche del settore scientifico-disciplinare CHIM/08. È co-autore di un brevetto e ha coordinato progetti finanziati. La candidata risulta in posizione preminente in 18 delle 25 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione. Le 25 pubblicazioni sono complessivamente di buon livello editoriale, tutte pienamente coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08, e con un buon livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. Le pubblicazioni sono collocate nella categoria Medicinal Chemistry o affini e trattano di diversi approcci della analisi farmaceutica e tossicologica. Svolge attività didattica prevalentemente in corsi del SSD CHIM/08, con un contributo nella formazione di tesisti e di un dottorando. Attualmente è membro del Collegio di dottorato "Nutraceuticals and functional foods and human health" presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università degli Studi di Napoli e ha svolto altri ruoli istituzionali. Il giudizio complessivo sull'attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione della Prof.ssa Grumetto è buono.

2. Candidato: Prof. Orazio NICOLOTTI

Il Prof. Nicolotti ha conseguito l'abilitazione alla prima fascia nel settore scientifico-disciplinare CHIM/08 Chimica Farmaceutica nel 2017 e dal 2020 è professore ordinario in tale settore presso il Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco dell'Università degli Studi di Bari "Aldo Moro". Dal conseguimento del dottorato nel 2001, la sua produzione scientifica è stata complessivamente di ottimo livello, pienamente coerente con le tematiche del settore scientifico-disciplinare CHIM/08, generalmente continua nel tempo salvo brevi discontinuità in fase iniziale, con un chiaro progresso nella gestione e coordinamento di progetti di ricerca. Il candidato ha una posizione preminente in 18 pubblicazioni sulle 25 selezionate ai fini della valutazione. Le 25 pubblicazioni presentate sono pienamente coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08 e di livello complessivamente eccellente sia da un punto di vista della collocazione editoriale che per originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. È co-autore di un brevetto e ha ricoperto ruoli di responsabilità in 7 progetti di ricerca ammessi al finanziamento competitivo, dimostrando ottime capacità di leadership. Anche in ambito didattico, il Prof. Nicolotti ha dimostrato una vasta e continua attività, formando numerosi tesisti e seguendo dieci dottorandi come tutor. Per più un anno (2020-21) è stato coordinatore del Consiglio dei Corsi di Studio della Classe L29 presso il Dipartimento di

Farmacia-Scienze del Farmaco dell'Università di Bari "Federico II". Inoltre, ha partecipato all'attività di Collegi di Dottorato dello stesso Ateneo. Il giudizio complessivo sull'attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione della Prof. Nicolotti è ottimo.

3. Candidato: Prof. Dante ROTILI

Il Prof. Dante Rotili è professore associato nel settore scientifico-disciplinare CHIM/08 Chimica Farmaceutica presso l'Università degli Studi ROMA "La Sapienza" dal 2020 e ha conseguito l'abilitazione alla prima fascia nel settore CHIM/08 nel 2017. Dal conseguimento del dottorato nel 2007, la sua produzione scientifica è stata complessivamente di livello eccellente e continua nel tempo, pienamente coerente con le tematiche del SSD CHIM/08, con un chiaro progresso nella gestione e coordinamento di progetti di ricerca. Il candidato ha un ruolo di autore in posizione preminente in tutte le 25 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione. Le 25 pubblicazioni selezionate sono complessivamente di livello editoriale eccellente, sono tutte pienamente coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08 e sono tutte collocate nella categoria Medicinal Chemistry. Esse mostrano un eccellente livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. La sua attività di ricerca è stata premiata con il conferimento del prestigioso "Premio Farindustria 2011". È co-inventore di sette brevetti mostrando un'eccellente attitudine verso l'attività di terza missione, e ha ricoperto ruoli di responsabilità in 6 progetti di ricerca nazionali e 3 locali, dimostrando ottime capacità di leadership. Anche in ambito didattico, il Prof. Rotili ha dimostrato una vasta e continua attività, formando numerosi tesisti e dottorandi come tutor. Dal 2022 è referente del corso di laurea in Molecular biology, Medicinal Chemistry and Computer Science for Pharmaceutical Applications, in lingua Inglese, presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" e partecipa all'attività di due Collegi di Dottorato dello stesso Ateneo. Il giudizio complessivo sull'attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione del Prof. Rotili è eccellente.

ALLEGATO 2)

RELAZIONE FINALE della commissione giudicatrice della procedura di chiamata ad 1 posto di professore universitario di ruolo, fascia degli ordinari ai sensi dell'Art. 18, c. 4 della L. 240/2010, Dipartimento di Scienze, Gruppo Scientifico Disciplinare (GSD) 03/CHEM-07 Chimica Farmaceutica, Tossicologica, Nutraceutico Alimentare, delle Fermentazioni e dei Prodotti per il Benessere e per la Salute (già settore concorsuale 03/D1, Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutico-alimentari) Settore Scientifico Disciplinare (SSD) CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica)

La commissione giudicatrice per la procedura di chiamata ad 1 posto di professore universitario di ruolo, fascia degli ordinari, si è riunita nei seguenti giorni ed orari:

I riunione: giorno 29 Luglio 2024 dalle ore 11:00 alle ore 12:00;

II riunione: giorno 30 Agosto 2024 dalle ore 14:00 alle ore 19.15.

La Commissione ha tenuto complessivamente n. 2 riunioni iniziando i lavori il 29/07/2024 e concludendoli il 30/08/2024.

- Nella prima riunione la Commissione ha proceduto alla nomina del Presidente nella persona del Prof. Marco Macchia e del Segretario nella persona della Prof. Roberto Di Santo. Ciascun Commissario ha dichiarato di non avere relazioni di parentela ed affinità entro il 4° grado incluso con gli altri Commissari (art. 5 comma 2 D.lgs. 07.05.48 n. 1172) e l'insussistenza delle cause di astensione di cui all'art. 51 c.p.c. Quindi, presa visione degli atti normativi e regolamentari che disciplinano lo svolgimento delle procedure di chiamata (L. 240/2010, vigente Regolamento per la chiamata, la mobilità, i compiti didattici, il conferimento di incarichi di insegnamento e di didattica integrativa, il rilascio di autorizzazioni per attività esterne dei Professori e Ricercatori in servizio presso Roma Tre), la Commissione ha proceduto a fissare in dettaglio i criteri di massima per la valutazione dei candidati. I criteri, indicati nell'allegato n. 1 al Verbale 1 sono stati prontamente trasmessi al Responsabile del Procedimento per la pubblicazione.

- Nella seconda riunione, la Commissione, presa visione delle domande e della documentazione inviata, delle pubblicazioni effettivamente inviate, delle eventuali esclusioni operate dagli uffici e delle rinunce sino ad allora pervenute, ha deciso che i candidati da valutare ai fini della procedura sono n. 3 (tre), e precisamente:

1. Prof.ssa Lucia GRUMETTO
2. Prof. Orazio NICOLOTTI
3. Prof. Dante ROTILI

La Commissione, quindi, ha proceduto a visionare la documentazione che i candidati hanno inviato all'Università degli Studi Roma Tre. Sono state prese in esame, secondo l'ordine alfabetico dei candidati, solo le pubblicazioni corrispondenti all'elenco delle stesse allegato.

Sono state esaminate dapprima le pubblicazioni della candidata Prof.ssa Lucia GRUMETTO, poi le pubblicazioni del candidato Prof. Orazio NICOLOTTI e infine le pubblicazioni del candidato Prof. Dante ROTILI. Da parte di ciascun Commissario, si è proceduto all'esame dei titoli e delle pubblicazioni ai fini della formulazione dei singoli giudizi da parte degli stessi Commissari; poi, ciascun Commissario ha formulato il proprio giudizio individuale e la Commissione quello collegiale. I giudizi dei singoli Commissari e quello collegiale sono allegati al Verbale 2 quale sua parte integrante (**Allegato A**). Terminata la valutazione del curriculum, dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati, la Commissione ha esaminato collegialmente i 3 candidati. La discussione collegiale è avvenuta attraverso la comparazione dei giudizi individuali e collegiali espressi sui 3 candidati (**Allegato B**).

La Commissione, infine, redige la seguente relazione in merito alla proposta di chiamata del Prof. Dante ROTILI vincitore della procedura di chiamata ad 1 posto di professore universitario di ruolo, fascia degli ordinari, Dipartimento di Scienze, Gruppo Scientifico Disciplinare (GSD) 03/CHEM-07 Chimica Farmaceutica, Tossicologica, Nutraceutico Alimentare, delle Fermentazioni e dei Prodotti per il Benessere e per la Salute (già settore concorsuale 03/D1, Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutico-alimentari) Settore Scientifico Disciplinare (SSD) CHEM-07/A Chimica Farmaceutica (già CHIM/08 Chimica Farmaceutica) (**Allegato 2**).

TESTO RELAZIONE PER CHIAMATA VINCITORE

Il Prof. Dante Rotili è professore associato nel settore scientifico-disciplinare CHIM/08 Chimica Farmaceutica presso l'Università degli Studi ROMA "La Sapienza" dal 2020 e ha conseguito l'abilitazione alla prima fascia nel settore CHIM/08 nel 2017. Dal conseguimento del dottorato nel 2007, la sua produzione scientifica è stata complessivamente di livello eccellente e continua nel tempo, pienamente coerente con le tematiche del SSD CHIM/08, con un chiaro progresso nella gestione e coordinamento di progetti di ricerca. Il candidato ha un ruolo di autore in posizione preminente in tutte le 25 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione. Le 25 pubblicazioni selezionate sono complessivamente di livello editoriale eccellente, sono tutte pienamente coerenti con la declaratoria del SSD CHIM/08 e sono tutte collocate nella categoria Medicinal Chemistry. Esse mostrano un eccellente livello di originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza. La sua attività di ricerca è stata premiata con il conferimento del prestigioso "Premio Farindustria 2011". È co-inventore di sette brevetti mostrando un'eccellente attitudine verso l'attività di terza missione, e ha ricoperto ruoli di responsabilità in 6 progetti di ricerca nazionali e 3 locali, dimostrando ottime capacità di leadership. Anche in ambito didattico, il Prof. Rotili ha dimostrato una vasta e continua attività,

formando numerosi tesisti e dottorandi come tutor. Dal 2022 è referente del corso di laurea in Molecular biology, Medicinal Chemistry and Computer Science for Pharmaceutical Applications, in lingua Inglese, presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università di Roma "La Sapienza" e partecipa all'attività di due Collegi di Dottorato dello stesso Ateneo. Il giudizio complessivo sull'attività scientifica, didattica, istituzionale e di terza missione del Prof. Rotili è eccellente.

Il Prof. Marco Macchia, Presidente della presente Commissione, delega il segretario Prof. Roberto Di Santo a consegnare tutti gli atti concorsuali (costituiti da una copia dei verbali delle singole riunioni, dei quali costituiscono parte integrante i giudizi individuali e collegiali espressi su ciascun candidato, ed una copia della relazione), al Responsabile del Procedimento massimo.calano@uniroma3.it ed in cc a giovanna.mele@uniroma3.it e diego.mazzamuto@uniroma3.it per i conseguenti adempimenti.

La Commissione viene sciolta alle ore 19.15.

30 Agosto 2024

Letto approvato e sottoscritto seduta stante.
Per la Commissione

F.to Prof. Roberto Di Santo (segretario)

Procedura di chiamata ad 1 posto di professore universitario di ruolo, fascia degli ordinari ai sensi dell'Art. 18, c. 4 della L. 240/2010, Dipartimento di Scienze G.S.D. 03/CHEM-07 (ex 03/D1), s.s.d. CHEM-07/A (ex CHIM/08) Chimica Farmaceutica

DICHIARAZIONE

Il sottoscritto Prof. Marco Macchia, membro della Commissione Giudicatrice della procedura di chiamata ad 1 posto di professore universitario di I fascia, Dipartimento di Scienze dell'Università degli Studi di Roma Tre, settore concorsuale 03/D1 , S.S.D. CHIM/08, riservata al personale esterno all'Ateneo, ai sensi dell'Art. 18, c. 4 della L. 240/2010, il cui avviso è stato pubblicato sulla G.U. n. 48 del 14/06/2024, con la presente dichiara di aver partecipato, via telematica, alla suddetta procedura di chiamata e di concordare con il verbale a firma del Prof. Roberto Di Santo, che sarà presentato agli uffici dell'Ateneo di Roma Tre, per i provvedimenti di conseguenza.

Firmato

Data
30/08/2024

F.to Prof. Marco Macchia

Procedura di chiamata ad 1 posto di professore universitario di ruolo, fascia degli ordinari ai sensi dell'Art. 18, c. 4 della L. 240/2010, Dipartimento di Scienze G.S.D. 03/CHEM-07 (ex 03/D1), s.s.d. CHEM-07/A (ex CHIM/08) Chimica Farmaceutica

DICHIARAZIONE

Il sottoscritto Prof. Vincenzo Summa, membro della Commissione Giudicatrice della procedura di chiamata ad 1 posto di professore universitario di I fascia, Dipartimento di Scienze dell'Università degli Studi di Roma Tre, settore concorsuale 03/D1 , S.S.D. CHIM/08, riservata al personale esterno all'Ateneo, ai sensi dell'Art. 18, c. 4 della L. 240/2010, il cui avviso è stato pubblicato sulla G.U. n. 48 del 14/06/2024, con la presente dichiara di aver partecipato, via telematica, alla suddetta procedura di chiamata e di concordare con il verbale a firma del Prof. Roberto Di Santo, che sarà presentato agli uffici dell'Ateneo di Roma Tre, per i provvedimenti di conseguenza.

Firmato

Data
30/08/2024

F.to Prof. Vincenzo Summa