

## MARIANGELA AGAMENNONE

### CURRICULUM VITAE

#### POSIZIONE ATTUALE

- *Marzo 2017*  
**Abilitazione Scientifica Nazionale** (ASN 2016) per la posizione di Professore Associato, Settore concorsuale 03/D1, SSD CHIM/08.
- *Febbraio 2005 – oggi.*  
**Ricercatore in Chimica Farmaceutica**, SSD CHIM/08, settore concorsuale 03/D1  
*Dipartimento di Farmacia, Università degli Studi "G. d'Annunzio" di Chieti.*  
L'attività di ricerca è incentrata sullo sfruttamento dei metodi computazionali (meccanica molecolare, docking, (3D-)QSAR, virtual screening, chemioinformatica, dinamica molecolare) come supporto al drug design. I temi di ricerca di interesse riguardano principalmente: l'individuazione e lo studio di inibitori delle MMP e altre zinco-proteasi (es. HDAC, CA), come potenziali farmaci antitumorali; l'identificazione di piccole molecole come inibitori di interazioni proteina-proteina coinvolte nei processi tumorali e neurodegenerativi, e lo studio di peptidi o piccole molecole con attività antinfluenzale.

#### ESPERIENZE PROFESSIONALI

- 27 novembre – 7 dicembre 2009  
**Visiting Scientist**  
Department of Chemistry, and the Center for Biophysical Sciences and Engineering, at the University of Alabama at Birmingham, USA.
- *Novembre 2005 - novembre 2007*  
**Borsa di ricerca**  
Siena Biotech SpA, Siena, Italy.  
Borsa di ricerca finanziata dalla Provincia di Siena per l'attrazione dei ricercatori in azienda.  
Titolo: "Identificazione di Nuovi Inibitori di Metalloproteasi di matrice attraverso struttura a raggi X del target proteico".  
In questi due anni l'attività di ricerca è stata svolta presso l'Unità di Drug Design di Siena Biotech SpA sotto la supervisione del Dr. Alessandro Padova, capo dell'Unità, e a stretto contatto con le altre unità dell'azienda per lo sviluppo integrale dei progetti. La ricerca svolta ha riguardato l'applicazione di varie metodologie computazionali applicate al drug design; in particolare, sono state condotte campagne di virtual screening, sia seguendo diversi approcci structure- e ligand-based, rivolte allo studio di: inibitori delle HDAC; inibitori dell'interazione proteina-proteina p53-MDM2 nell'ambito del progetto europeo DEPICT; inibitori dell'interazione proteina-proteina p53-S100B.
- *Marzo 2003 - febbraio 2005*  
**Assegno per la collaborazione all'attività di ricerca**  
Dipartimento di Scienze del Farmaco dell'Università degli Studi "G. d'Annunzio" di Chieti, Italy.

Assegno per la collaborazione all'attività di ricerca della durata di un anno e rinnovabile dal titolo: "Progettazione e sintesi di inibitori di IRT  $\beta$ -lattamasi", Settore Scientifico disciplinare CHIM/08. Tutor: Prof. Carlo Gallina. Il progetto in questione ha avuto come obiettivo lo sviluppo di inibitori boronici delle  $\beta$ -lattamasi a serina utili nel trattamento dell'antibiotico-resistenza, in collaborazione con il Prof. Amicosante dell'Università degli Studi dell'Aquila.

- *Maggio 2002 - dicembre 2003*

#### **Post-dottorato**

Dipartimento Farmaco Chimico Tecnologico dell'Università degli Studi di Siena, Italy.

Collaborazione scientifica con il Prof. Maurizio Botta, allo scopo di acquisire competenze nell'ambito delle principali tecniche di molecular modeling, in particolare di analisi conformazionale, docking e di 3D-QSAR, utilizzando i software Macromodel 6.5, Insight II, MOPAC, Grid e Catalyst. Il progetto di ricerca ha riguardato la progettazione di nuovi inibitori boronici di  $\beta$ -lattamasi, utili nel trattamento dell'antibiotico-resistenza.

- *Luglio 1999 - aprile 2000*

#### **Borsa di studio del MiPAAF (Ministero delle Politiche Agricole e Forestali)**

Istituto Sperimentale per la Elaiotecnica di Città S. Angelo (PE).

Borsa di studio della durata di 11 mesi rinnovabili.

Titolo: "Maturazione nera del frutto oliva: schema biosintetico".

Ha svolto, inoltre, controllo di qualità dell'olio d'oliva secondo i metodi ufficiali CEE e attività di ricerca rivolta all'individuazione e affinamento di nuove tecniche analitiche, in collaborazione con il COI (Comitato Oleicolo Internazionale).

#### TITOLI DI STUDIO

- *Novembre 2002: Dottorato di Ricerca in Scienze del Farmaco*, conseguito presso l'Università degli Studi "G. d'Annunzio" di Chieti.  
Tesi dal titolo: "Inibitori di MMP che utilizzano come GLZ le funzioni fosfonato, N-idrossiurea ed N-idrossicarbammato: sintesi e valutazione biologica".  
Tutor Prof. Carlo Gallina.
- *11 novembre 1998: Diploma di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche*, votazione 110/110 e lode, conseguito presso l'Università degli Studi "G. d'Annunzio" di Chieti.  
Tesi sperimentale, svolta presso l'Istituto di Chimica Organica, dal titolo: "Catalisi acido-base e metallica nella reazione di enolizzazione del 5-acetilpirazolo".  
Relatore Prof. Paolo De Maria.
- *Anno scolastico 1992-1993: Licenza liceale*, conseguita presso il Liceo Ginnasio "G. d'Annunzio" di Pescara. Votazione 60/60.

#### ABILITAZIONE PROFESSIONALE

- *Dicembre 1999: Conseguitamento dell'Abilitazione alla professione di Farmacista.*

### PROGETTI FINANZIATI E CONTO TERZI

- *PRIN 2009* - Modulatori della permeabilità mitocondriale e di p53 nel controllo della morte in cellule tumorali: identificazione di nuovi inibitori dell'interazione p53-MDM2/MDMX mediante virtual screening e sintesi di molecole a basso peso molecolare.  
Ruolo: partecipante. Finanziamento: 50.000 Eur. Durata 24 mesi.
- *Programma di ricerca finalizzata 2007. Ministero della Salute* - Studio e sviluppo di nuovi farmaci antivirali contro infezioni da virus influenzale A-H1N1.  
Ruolo: capo unità. Finanziamento 53.000 Eur. Durata 12 mesi.
- *Contratto di collaborazione scientifica finanziato da Siena Biotech SpA.* - Individuazione di piccole molecole inibitori di protein-protein interactions da utilizzare nel trattamento delle patologie tumorali in particolare a carico del SNC, legato al Progetto Europeo DePPICT no. LSHM-CT-2007-03783.  
Ruolo: responsabile del progetto. Finanziamento 7.500 euro. Durata 12 mesi.

### ATTIVITA' DIDATTICA

- *Dall' AA 2004-2005 ad oggi*

Titolare del corso di Analisi dei Medicinali (10 CFU) per il Corso di Studi in CTF, organizzato in 60 ore di lezioni frontali ed almeno 40 ore di esercitazioni pratiche di laboratorio.

Presidente della Commissione di Esame di Analisi dei Medicinali per il corso di Studio in CTF.

Componente della Commissione degli Esami di Laura in CTF e Farmacia.

- *Dall'AA 2016-17 ad oggi*

Titolare del corso di Progettazione e sviluppo dei farmaci (3 CFU) per i Corsi di Studio in CTF e Farmacia, organizzato in 18 ore di lezione frontale e 12 ore di esercitazione al computer.

Presidente della Commissione di Esame di Progettazione e sviluppo dei farmaci per i corsi di Studio in Farmacia e CTF.

- *A.A. 2000-2001 ad oggi*

Componente di Commissioni di Esame nell'ambito del settore disciplinare CHIM/08, in particolare per l'Insegnamento di Chimica Farmaceutica e Tossicologica II (titolari Prof. Carlo Gallina e Prof.ssa Grazia Luisi) e Analisi dei Farmaci I (titolare Prof. Paolo Tortorella) per i Corsi di Laurea di Chimica e Tecnologia Farmaceutiche e Farmacia dell'Università "G. D'Annunzio" Chieti.

Assistenza alle esercitazioni di laboratorio dell'insegnamento di Analisi dei Farmaci I, del Corso di Laurea in CTF.

- *Dal AA 2004-2005 ad oggi*

Relatore di circa 30 tesi di Laurea Sperimentali e Compilative di laureandi dei Corsi di Laurea in CTF e Farmacia, Facoltà di Farmacia, Università "G. d'Annunzio" di Chieti.

#### ATTIVITA' DI TUTORATO ASSEGNI DI RICERCA, BORSE E DOTTORATO

- *Aprile 2014 – marzo 2015*  
Tutor dell'Assegno di Ricerca "New strategies for diagnostic, therapeutic and clinical care infection and immunity".
- *Dicembre 2012- novembre 2013*  
Tutor dell'Assegno di Ricerca di durata annuale dal titolo: "Identificazione e studio di nuovi inibitori delle MMP attraverso metodi computazionali".
- *Marzo 2010 – febbraio 2011*  
Tutor Borsa di Studio dal titolo: "Approcci computazionali per l'identificazione di nuove molecole che bloccano l'emoagglutinina a potenziale attività anti-influenzale"
- *Gennaio 2009 – dicembre 2011*  
Tutor della Tesi di Dottorato Europeo dal titolo: "Computational and crystallographic studies of zinc-containing enzyme inhibition".

#### ATTIVITA' ISTITUZIONALI

- *Ottobre 2008 – settembre 2009*  
Membro del collegio dei docenti (codice DOT0353348).
- *Giugno 2017- dicembre 2019*  
Membro della commissione per l'attribuzione delle borse di tutorato rivolte agli studenti dei corsi di studio in Farmacia e CTF.

#### ATTIVITA' DI REVISIONE

- Revisore per numerose riviste scientifiche internazionali tra cui: Journal of Medicinal Chemistry, European Journal of Medicinal Chemistry, Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters, Biomolecules, Molecules, Pharmaceuticals, International Journal of Molecular Sciences, New Journal of Chemistry, Future Medicinal Chemistry, Chemmedchem, Drug Research, Scientific Reports, Journal of Computer-Aided Molecular Design, Bioorganic and Medicinal Chemistry, MedChemCom.
- *2018*  
Revisore di progetti presentati nell'ambito della call PRELUDIUM per il Poland National Science Center.
- *Febbraio 2017*  
Revisore esterno per la tesi di dottorato in Chimica Farmaceutica dell'Università "Aldo Moro" di Bari, Italy.

### APPARTENENZA A SOCIETÀ SCIENTIFICHE

Membro della Società Chimica Italiana dal 1999.

### AWARDS

- XXII Advanced course in Pharmaceutical Chemistry and National seminar for PhD students E. Duranti, Urbino 1 – 5 luglio 2002, Poster Primo classificato e selezionato per la comunicazione orale.
- L'articolo pubblicato su Chemmedchem intitolato "Probing the S1' Site for the Identification of Non-Zinc-Binding MMP-2 Inhibitors" (*ChemMedChem*, **2013**, 8, 1475 – 1482) è stato riconosciuto come Very Important Paper (VIP) e premiato con la Cover picture.
- L'articolo pubblicato su Chemmedchem intitolato "Biphenyl Sulfonylamino Methyl Bisphosphonic Acids as Inhibitors of Matrix Metalloproteinases and Bone Resorption" (*ChemMedChem*, 6, **2011**, 1258-1268) è stato riconosciuto come Very Important Paper (VIP) e premiato con la Cover picture.

### ORGANIZZAZIONE DI CONGRESSI

- 16-20 settembre 2007  
Membro del Comitato Organizzatore del XVIII Congresso Nazionale di Chimica Farmaceutica, Chieti, Italy.

### COMUNICAZIONI A CONGRESSI

- M. Agamennone, P. Tortorella, S. Lucci, C. Campestre, M. Crucianelli, A. Aramini, R. Ragno, F. Mazza, C. Gallina *Inibitori fosfonati di MMP: Influenza di variazioni strutturali in P<sub>3</sub> sulla potenza e sulla selettività d'azione.*  
Riccione 1<sup>st</sup> Sigma Aldrich Young Chemists Symposium, 18 – 19 ottobre 2001. (Comunicazione orale)
- Mariangela Agamennone *Matrix metalloproteinases inhibitors, synthesis and biological evaluation.*  
Urbino. XXII Advanced course in Pharmaceutical Chemistry and National seminar for Ph.D students E. Duranti, 1 – 5 luglio 2002. (Poster e comunicazione orale)
- M. Agamennone, P. Tortorella, S. Lucci, C. Campestre, M. Crucianelli, A. Aramini, R. Ragno, F. Mazza, C. Gallina *Synthesis and biological evaluation of new matrix metalloproteinases inhibitors.*  
Firenze. 23<sup>rd</sup> IUPAC - International symposium on the chemistry of natural products, 28 luglio - 2 agosto 2002. (Poster)
- M. Agamennone, S. Lucci, C. Campestre, P. Tortorella, C. Gallina *Tripeptide Phosphonate Inhibitors of Matrix metalloproteinases.*  
Barcellona (Spagna). XVIIth International Symposium on Medicinal Chemistry, 1-5 settembre. 2002. (Poster)
- M. Agamennone, A. Tafi, C. Gallina, M. Botta *AMBER\* force field parameterization for alkyl and aryl boronic acids.*  
Certosa di Pontignano (Siena). Fourth European Workshop in Drug Design. 25 maggio – 1 giugno 2003. (Poster)
- M. Agamennone, A. Tafi, C. Gallina, M. Botta *Amber\* force field implementation to dock alkyl and aryl boronic acids as  $\beta$ -lactamases inhibitors.*

- Cracovia (Polonia). Polish-Austrian-German-Hungarian-Italian Joint Meeting on Medicinal Chemistry, 15-18 ottobre 2003. (Poster)
- S. Preziuso, C. Campestre, M. Agamennone, P. Tortorella, G. Amicosante, C. Gallina *Derivatives of m-aminophenylboronic acid as  $\beta$ -lactamases inhibitors*. Cracovia (Polonia). Polish-Austrian-German-Hungarian-Italian Joint Meeting on Medicinal Chemistry, 15-18 ottobre 2003. (Poster)
  - C. Campestre, S. Preziuso, M. Agamennone, P. Tortorella, C. Gallina *Synthesis and biological evaluation of new Matrix Metalloproteinases Inhibitors*. Cracovia (Polonia). Polish-Austrian-German-Hungarian-Italian Joint Meeting on Medicinal Chemistry, 15-18 ottobre 2003. (Poster)
  - C. Campestre, M. Agamennone, A. Biasone, R. Micello, S. Preziuso, P. Tortorella, V. Politi, C. Gallina *Sintesi enantioselettiva di inibitori fosfonati di metalloproteinasi di matrice*. Pisa, XVII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica SCI, 6-10 settembre 2004. (Poster)
  - S. Preziuso, M. Agamennone, A. Biasone, C. Campestre, E. Gavuzzo, G. Pochetti, F. Mazza, H. Tschesche, P. Tortorella, C. Gallina *N-idrossiuree come inibitori di metalloproteinasi di matrice*. Pisa, XVII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica SCI, 6-10 settembre 2004. (Poster)
  - P. Tortorella, M. Agamennone, C. Campestre, S. Preziuso, A. Biasone, M. Chiappini, F. Mazza, E. Gavuzzo, G. Pochetti, V. Consalvi, O. Hiller, H. Tschesche, C. Gallina *Mode of binding of R- and S- sulfonamide phosphonate inhibitors in the active site of MMP-8*. Modena, Second Joint Italian-Swiss Meeting on Medicinal Chemistry, 12 - 16 settembre 2005. (Poster)
  - P. Tortorella, A. Laghezza, G. Fracchiolla, M.T. Rubino, M. Agamennone, C. Campestre, C. Gallina, P. Carelli, L. Panelli, A. Rossello *Synthesis and biological evaluation of sulfonyl phosphonic acids as new MMPs inhibitors*. Modena, Second Joint Italian-Swiss Meeting on Medicinal Chemistry, 12 - 16 settembre 2005. (Poster)
  - M. Agamennone, M. Andreini, A. Padova *Structure-based pharmacophore mapping of flexible macromolecules: targeting the S100B – p53 interaction*. Tilton, NH, (USA), Gordon Research Conference on Computer Aided Drug Design, Jul 29 - Aug 3 2007. (Poster)
  - M. Agamennone, C. Campestre, M. Chiappini, A. Laghezza, A. Marrone, N. Re, P. Tortorella, C. Gallina *New Matrix Metalloproteinase Inhibitors Based on N-hydroxyurea as zinc-binding group: synthesis, biological evaluation and computational studies*. Chieti. XVIII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, 16-20 Settembre 2007. (Poster)
  - M. Agamennone, A. Bakker, E. Dalla Pozza, A. Padova *Multiple virtual screening approaches to identify novel, non-hydroxamic class-I HDAC inhibitors*. Chieti. XVIII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, 16-20 Settembre 2007. (Poster)
  - A. Laghezza, M.T. Rubino, E. Panza, F. Liodice, G. Fracchiolla, M. A. Agamennone, C. Gallina, A. Rossello, E. Nuti, P. Tortorella *Sintesi e valutazione biologica di Acidi Aril-Solfonil-Fosfonici come Inibitori selettivi delle Metalloproteinasi di Matrice (MMP)*. Chieti. XVIII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, 16-20 Settembre 2007. (Poster)
  - A. Mollica, D. Torino, M. Paglialunga Paradisi, G. Lucente, I. Cacciatore, M. Agamennone, S. Spampanato, F. Pinnen *Synthesis and activity of ENdomorphin-1 and -2 analogues incorporatine azetidina-(S)-2-carboxylic acid and azetidina-3-carboxylic acid in place of native proline*.

- Chieti. XVIII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, 16-20 Settembre 2007. (Poster)
- L. Cesari, M. Agamennone, A. Padova, M. Andreini, S. Mangani, P. Turano, R. del Conte, D. Lalli *Fragment-based discovery of S100B inhibitors: when structural information meets in silico prediction*.  
Erice. International School of Crystallography, From Molecules to Medicines: Integrating Crystallography in Drug Discovery, 29 Maggio – 8 Giugno 2008. (Poster)
  - M. Agamennone, L. Cesari, M. Andreini, D. Lalli, R. del Conte, P. Turano, S. Mangani, A. Padova *Fragment-based discovery of S100B inhibitors combining computational and biophysical approaches*.  
Castelvecchio Pascoli (LU). III Meeting Nuove Prospettive in Chimica Farmaceutica, 13-14 febbraio 2009. (Comunicazione orale)
  - M. Agamennone. *Virtual Screening approaches for the identification of novel non zinc-binding MMP inhibitors*.  
L'Aquila (Italy). I Meeting 'Computationally Driven Drug Discovery', 21–23 novembre 2011. (Comunicazione orale)
  - M. Agamennone, A. Di Pizio, A. Laghezza, P. Tortorella *Combined virtual screening protocol for the identification of novel protein-protein interaction inhibitors*  
Genova (Italy). II Meeting 'Computationally Driven Drug Discovery'. 4-6 febbraio 2013. (Comunicazione orale)
  - M. Agamennone, A. Marrone, A. Stefanucci. *Nitrogen containing bisphosphonates as FPPS inhibitors: a computational study*.  
Roma (Italy). XII National Meeting on Medicinal Chemistry, 10-12 settembre 2013. (Poster)
  - M. Agamennone, A. Pietrantonì, F. Superti, *Fighting Influenza A virus: Identification and study of hemagglutinin binding hits*.  
Verona (Italy). Incontro Nazionale 'Computationally Driven Drug Discovery'. 4-6 marzo 2014. (Poster)
  - M. Agamennone, F. Lannutti, S. Milone, A. Pietrantonì, F. Superti, *Identificazione e studio di nuovi agenti antinfluenzali ad ampio spettro*.  
Chieti (Italy). X Congresso Nazionale della Società Italiana di Microbiologia Farmaceutica. 6-7 giugno 2014. (Comunicazione orale)
  - M. Agamennone, A. Di Pizio, A. Laghezza, F. Loiodice, P. Tortorella, *Identification of new non-zinc-binding MMP-2 inhibitors*.  
Schrödinger 18th Annual European User Group Meeting, 26-28 settembre 2018, Roma, Italy (Poster)
  - M. Agamennone, R. Paciotti, L. Storchi, F. Sommonte, A. Marrone, Roma (Italy). IV Meeting 'Computationally Driven Drug Discovery'. 28-29 marzo 2019. (Comunicazione Orale)
  - M. Agamennone, V.N. Ivanov, I.R. Iusupov, A. Laghezza, D.S. Belov, E.V. Manasova, A. Altieri, P. Tortorella, A.V. Kurkin, *Tackling cancer: exploring the arylsatin scaffold to get the ideal MMPI selectivity profile*. (Poster). XXVI National Meeting in Medicinal Chemistry, 16-19 luglio 2019, Milano, Italy.

#### BREVETTI

- Brevetto europeo n. **EP 2780365 B1**  
Titolo: Lactoferrin derived peptides for use as broad- spectrum inhibitors of influenza virus infection  
Titolari: Istituto Superiore di Sanità, University "G. d'Annunzio" of Chieti  
Inventori: Superti F. E.D., Agamennone M., Ammendolia M.G., Pietrantonì A., Lanutti F.  
Data di deposito: 16.11.2012

- Brevetto Italiano No **000140832** del 16/11/2011.  
 Titolo: "Peptidi della Lattoferrina per l'uso come inibitori ad ampio spettro dell'infezione da virus dell'influenza".  
 Titolari: Istituto Superiore di Sanità e Università "G. d'Annunzio" di Chieti-Pescara  
 Inventori: Superti F. E. D., Agamennone M., Ammendolia M. G., Pietrantonì A., Lannutti F.  
 Data di deposito: 16.11.2011

### PUBBLICAZIONI

42. M.C. Scala, M. Agamennone, A. Pietrantonì, V. Di Sarno, A. Bertamino, F. Superti, P. Campiglia, M. Sala  
 Discovery of a Novel Tetrapeptide Against Influenza A Virus: Rational Design, Synthesis, Bioactivity Evaluation and Computational Studies  
*Pharmaceuticals*, **2021**, accepted for publication.
  
41. M. Agamennone, A. Nicoli, S. Bayer, V. Weber, L. Borro, S. Gupta, M. Fantacuzzi, A. Di Pizio.  
 Protein-protein interactions at a glance: Protocols for the visualization of biomolecular interactions  
*Methods in Cell Biology*, **2021**, in press book chapter  
[doi.org/10.1016/bs.mcb.2021.06.012](https://doi.org/10.1016/bs.mcb.2021.06.012)  
 I.F. 1.441 (2020) Q4
  
40. M. Agamennone, L. Storchi, R. Paciotti  
 Hampering the early aggregation of PrP-E200K protein by charge-based inhibitors: a computational study  
*J.C.A.M.D.*, **2021**, in press  
[doi.org/10.1007/s10822-021-00393-7](https://doi.org/10.1007/s10822-021-00393-7)  
 I.F. 3.686 (2020) Q2
  
39. A. Ammazalorso, M. Agamennone, B. De Filippis, M. Fantacuzzi  
 Development of CDK4/6 Inhibitors: A Five Years Update  
*Molecules*, **2021**, 26(5):1488  
[doi.org/10.3390/molecules26051488](https://doi.org/10.3390/molecules26051488)  
 I.F. 4.411 (2020) Q2
  
38. A. Laghezza, L. Piemontese, L. Brunetti, A. Caradonna, M. Agamennone, F. Liodice, P. Tortorella.  
 (2-Aminobenzothiazole)-Methyl-1,1-Bisphosphonic Acids: Targeting Matrix Metalloproteinase 13 Inhibition to the Bone  
*Pharmaceuticals* **2021**, 14(2), 85  
[doi.org/10.3390/ph14020085](https://doi.org/10.3390/ph14020085)  
 I.F. 5.863 (2020) Q1
  
37. D. Rocchi, C. Blázquez-Barbadillo, M. Agamennone, A. Laghezza, P. Tortorella, D. Vicente-Zurdo, N. Rosales-Conrado, P. Moyano, J. del Pino, J. F. González, J. C. Menéndez.  
 Discovery of 7-aminophenanthridin-6-one as a new scaffold for matrix metalloproteinase inhibitors with multitarget neuroprotective activity  
*Eur. J. Med. Chem.* **2021**, 210, 113061  
[doi.org/10.1016/j.ejmech.2020.113061](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2020.113061)  
 I.F. 6.514 (2020) Q1
  
36. A. Laghezza, L. Piemontese, L. Brunetti, A. Caradonna, M. Agamennone, A. Di Pizio, G. Pochetti, R. Montanari, D. Capelli, M. Tauro, F. Liodice, P. Tortorella.  
 Bone-seeking matrix metalloproteinase inhibitors for the treatment of skeletal malignancy  
*Pharmaceuticals* **2020**, 13(6),113  
[doi.org/10.3390/ph13060113](https://doi.org/10.3390/ph13060113)  
 I.F. 5.863 Q1



35. R. Paciotti, M. Agamennone, C. Coletti, L. Storchi.  
Characterization of PD-L1 binding sites by a combined FMO/GRID-DRY approach  
*J.C. A.M. D.* **2020** 34(8), 897-914  
[doi.org/10.1007/s10822-020-00306-0](https://doi.org/10.1007/s10822-020-00306-0)  
I.F. 3.686 Q2
34. A. Laghezza, G. Luisi, A. Caradonna, A. Di Pizio, L. Piemontese, F. Liodice, M. Agamennone,\*  
P. Tortorella.  
Virtual screening identification and chemical optimization of substituted 2-arylbenzimidazoles  
as new non-zinc-binding MMP-2 inhibitors  
*Bioorg. Med. Chem.* **2020**, 28, 115257  
[doi.org/10.1016/j.bmc.2019.115257](https://doi.org/10.1016/j.bmc.2019.115257)  
I.F. 3.641 Q2
33. F. Superti, M. Agamennone, A. Pietrantonì and M. G. Ammendolia.  
Bovine Lactoferrin Prevents Influenza A Virus Infection by Interfering with the Fusogenic  
Function of Viral Hemagglutinin  
*Viruses* **2019**, 11(1), 51  
[doi:10.3390/v11010051](https://doi.org/10.3390/v11010051)  
I.F. 3.82 Q2
32. S. Savino, A. Toscano, R. Purgatorio, E. Profilo, A. Laghezza, P. Tortorella, M. Angelelli, R.  
Scala, D. Tricarico, C. M. T. Marobbio, F. Perna, P. Vitale, M. Agamennone, V. Dimiccoli, A.  
Tolomeo, A. Scilimati.  
Novel bisphosphonates with antiresorptive effect in bone mineralization and  
osteoclastogenesis  
*Eur. J. Med. Chem.* **2018**, 158, 184-200,  
[doi.org/10.1016/j.ejmech.2018.08.044](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2018.08.044)  
I.F. 4.83 Q1
31. A. Di Pizio, M. Agamennone, A. Laghezza, F. Liodice, P. Tortorella.  
Mimic catechins to develop selective MMP-2 inhibitors  
*Monatshefte fuer Chemie*, **2018**, 149, 1293-1300,  
[doi.org/10.1007/s00706-018-2237-4](https://doi.org/10.1007/s00706-018-2237-4)  
I.F. 1.50 Q3
30. M. De Colli, P. Tortorella, M. Agamennone, C. Campestre, F. Liodice, A. Cataldi, S. Zara.  
Bisphosphonate matrix metalloproteinase inhibitors for the treatment of periodontitis: An in vitro  
study  
*International Journal of Molecular Medicine*, **2018**, 42, 651-657,  
[doi.org/10.3892/ijmm.2018.3641](https://doi.org/10.3892/ijmm.2018.3641)  
I.F. 2.93 Q2
29. G. Luisi, G. Angelini, C. Gasbarri, A. Laghezza, M. Agamennone, F. Liodice, C.T. Supuran, C.  
Campestre, P. Tortorella.  
Dual targeting of cancer-related human matrix metalloproteinases and carbonic anhydrases by  
chiral N-(biarylsulfonyl)-phosphonic acids  
*J. Enzyme Inhib. Med. Chem.*, **2017**, 32, 1260-1264,  
[doi.org/10.1080/14756366.2017.1378192](https://doi.org/10.1080/14756366.2017.1378192)  
I.F. 3.64 Q1
28. M.C. Scala, M. Sala, A. Pietrantonì, A. Spensiero, S. Di Micco, M. Agamennone, A. Bertamino,  
E. Novellino, G. Bifulco, I.M. Gomez-Monterrey, F. Superti, P. Campiglia.  
Lactoferrin-derived Peptides Active towards Influenza: Identification of Three Potent  
Tetrapeptide Inhibitors  
*Scientific Reports*, **2017**, 7, 10593,  
[doi:10.1038/s41598-017-10492-x](https://doi.org/10.1038/s41598-017-10492-x)  
I.F. 4.122 Q1

27. A. Ammazalorso, B. De Filippis, C. Campestre, A. Laghezza, A. Marrone, R. Amoroso, P. Tortorella, M. Agamennone\*.  
Seeking for non-zinc-binding MMP-2 inhibitors: synthesis, biological evaluation and molecular modelling studies  
*Int. J. Mol. Sci*, **2016**, *17*, 1768.  
[doi:10.3390/ijms17101768](https://doi.org/10.3390/ijms17101768)  
I.F. 3.23 Q2
26. M. Tauro, A. Laghezza, F. Liodice, L. Piemontese, A. Caradonna, D. Capelli, R. Montanari, G. Pochetti, A. Di Pizio, M. Agamennone, C. Campestre, P. Tortorella.  
Catechol-based matrix metalloproteinase inhibitors with additional antioxidative activity.  
*J. Enzyme Inhib. Med. Chem.*, **2016**, *31(S4)*, 25-37:  
[doi: 10.1080/14756366.2016.1217853](https://doi.org/10.1080/14756366.2016.1217853)  
I.F. 4.29 Q1
25. M. Agamennone\*, D. S. Belov, A. Laghezza, V. N. Ivanov, A. M. Novoselov, I. A. Andreev, N. K. Ratmanova, A. Altieri, P. Tortorella, A. V. Kurkin\*.  
Fragment-Based Discovery of 5-Arylisatin based Inhibitors of Matrix Metalloprotease-2 and 13.  
*Chemmedchem*, **2016**, *11*, 1892-1898:  
[doi: 10.1002/cmdc.201600266](https://doi.org/10.1002/cmdc.201600266)  
I.F. 3.225 Q2
24. P. Tortorella, A. Laghezza, M. Durante, I. Gomez-Monterrey, A. Bertamino, P. Campiglia, F. Liodice, S. Daniele, C. Martini, M. Agamennone\*.  
An Effective Virtual Screening Protocol To Identify Promising p53–MDM2 Inhibitors.  
*J. Chem. Inf. Model.*, **2016**, *56*, 1216-1227;  
[doi: 10.1021/acs.jcim.5b00747](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.5b00747)  
I.F. 3.76 Q1
23. M. C. Gidaro, S. Alcaro, D. Secci, D. Rivanera, A. Mollica, M. Agamennone, L. Giampietro, S. Carradori.  
Identification of new anti-Candida compounds by ligand-based pharmacophore virtual screening.  
*J. Enzyme Inhib. Med. Chem.*, **2016**, *31*, 1703-1706;  
[doi:10.3109/14756366.2016.1156103](https://doi.org/10.3109/14756366.2016.1156103)  
I.F. 4.29 Q1
22. M. Agamennone, A. Pietrantoni, F.E.D. Superti.  
Identification of Small Molecules Acting Against H1N1 Influenza A Virus.  
*Virology*, **2016**, *488*, 249-258.  
[doi:10.1016/j.virol.2015.11.024](https://doi.org/10.1016/j.virol.2015.11.024)  
I.F. 3.35 Q2
21. A. Di Pizio, M. Agamennone, P. Tortorella,  
Non-zinc-binding inhibitors of MMP-13: GRID-based approaches to rationalize the binding process.  
*Curr. Topics Med. Chem.* **2016**, *16*, 449-459.  
[doi: 10.2174/1568026615666150813150631](https://doi.org/10.2174/1568026615666150813150631)  
I.F. 2.56 Q2
20. M. De Colli, P. Tortorella, G. D. Marconi, M. Agamennone, C. Campestre, M. Tauro, A. Cataldi, S. Zara.  
In vitro comparison of new bisphosphonic acids and zoledronate effects on human gingival fibroblasts viability, inflammation and matrix turnover.  
*Clinical Oral Investigations* **2016**, *20*, 2013-2021;  
[doi:10.1007/s00784-015-1690-2](https://doi.org/10.1007/s00784-015-1690-2)  
I.F. 2.30 Q1

19. B. De Filippis, M. Agamennone, A. Ammazalorso, I. Bruno, A. D'Angelo, M. Di Matteo, M. Fantacuzzi, L. Giampietro, A. Giancristofaro, C. Maccallini, R. Amoroso, PPAR $\alpha$  agonists based on stilbene and its bioisosteres: biological evaluation and docking studies.  
*Med. Chem. Commun.*, **2015**, 6, 1513-1517.  
[doi: 10.1039/C5MD00151J](https://doi.org/10.1039/C5MD00151J)  
I.F. 2.319 Q3
18. C. Campestre, M. Agamennone, M. Tauro, P. Tortorella,  
Phosphonate Emerging Zinc Binding Group in Matrix Metalloproteinase Inhibitors.  
*Curr Drug Targets*. **2015**, 16, 1634-1644.  
[doi: 10.2174/1389450116666150113121733](https://doi.org/10.2174/1389450116666150113121733)  
I.F. 3.029 Q2
17. A. Stefanucci, A. Marrone, M. Agamennone\*,  
Investigation of the N-BP Binding at FPPS by Combined Computational Approaches.  
*Medicinal Chemistry*, **2015**, 11, 417-431.  
[doi: 10.2174/1573406410666141226132630](https://doi.org/10.2174/1573406410666141226132630)  
I.F. 1.458 Q3
16. A. Ferrucci, L. Leboffe, M. Agamennone, A. Di Pizio, M. Fiocchetti, M. Marino, P. Ascenzi, G. Luisi,  
Ac-tLeu-Asp-H is the minimal and highly effective human caspase-3 inhibitor - Biological and *in silico* studies.  
*Amino Acids*, **2015**, 47, 153-162.  
[doi: 10.1007/s00726-014-1855-3](https://doi.org/10.1007/s00726-014-1855-3).  
I.F. 3.196 Q2
15. M. Tauro, A. Laghezza, F. Loiodice, M. Agamennone, C. Campestre, P. Tortorella,  
Arylamino methylene bisphosphonate derivatives as bone seeking matrix metalloproteinase inhibitors.  
*Bioorganic & Medicinal Chemistry*, **2013**, 21, 6456–6465.  
[doi: 10.1016/j.bmc.2013.08.054](https://doi.org/10.1016/j.bmc.2013.08.054)  
I.F. 2.951 Q2
14. A. Di Pizio, A. Laghezza, P. Tortorella, M. Agamennone\*,  
Probing the S1' Site for the Identification of Non-Zinc-Binding MMP-2 Inhibitors.  
*ChemMedChem*, **2013**, 8, 1475 – 1482. VIP  
[doi: 10.1002/cmdc.201300186](https://doi.org/10.1002/cmdc.201300186)  
I.F. 3.046 Q2
13. M. Giustiniano, P. Tortorella, M. Agamennone, A. Di Pizio, A. Rossello, E. Nuti, I. Gomez-Monterrey, E. Novellino, P. Campiglia, E. Vernieri, M. Sala, A. Bertamino, A. Carotenuto,  
Amino Acid Derivatives as New Zinc Binding Groups for the Design of Selective Matrix Metalloproteinase Inhibitors.  
*Journal of Amino Acids*, **2013**, Article ID 178381, 12 pages.  
[doi: 10.1155/2013/178381](https://doi.org/10.1155/2013/178381)
12. L. Zhao, A. Marquis, V. D. La, M. Agamennone, F. Loiodice, P. Tortorella, D. Grenier,  
Effects of Biphenyl Sulfonylamino Methyl Bisphosphonic Acids on Porphyromonas Gingivalis and Cytokine Secretion by Oral Epithelial Cells.  
*Medicinal Chemistry*, **2013**, 9, 855-860.  
[doi: 10.2174/1573406411309060009](https://doi.org/10.2174/1573406411309060009)  
I.F. 1.387 Q3
11. A. Di Pizio, M. Agamennone\*, M. Aschi,  
An Integrated Computational Approach to Rationalize the Activity of Non-Zinc-Binding MMP-2 Inhibitors.  
*PLoS ONE*, **2012**, 7(11): e47774.

[doi:10.1371/journal.pone.0047774](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0047774)

I.F. 3.730 Q1

10. M. G. Ammendolia, M. Agamennone, A. Pietrantonio, F. Lannutti, R. A. Siciliano, B. De Giulio, C. Amici, F. Superti,  
Bovine lactoferrin-derived peptides as novel broad-spectrum inhibitors of influenza virus.  
*Pathogens and Global Health*, 106, **2012**, 12-19.  
[doi: 10.1179/2047773212Y.0000000004](https://doi.org/10.1179/2047773212Y.0000000004)  
I.F. 0.8 (2013) Q4
9. M. T. Rubino, M. Agamennone, C. Campestre, P. Campiglia, V. Cremasco, R. Faccio, A. Laghezza, F. Liodice, D. Maggi, E. Panza, A. Rossello, P. Tortorella,  
Biphenyl Sulfonylamino Methyl Bisphosphonic Acids as Inhibitors of Matrix Metalloproteinases and Bone Resorption.  
*ChemMedChem*, 6, **2011**, 1258-1268. VIP  
[doi: 10.1002/cmdc.201000540](https://doi.org/10.1002/cmdc.201000540)  
I.F. 3.151 Q2
8. M. Agamennone, L. Cesari, D. Lalli, E. Turlizzi, R. Del Conte, P. Turano, S. Mangani, A. Padova  
Fragmenting the S100B-p53 Interaction: Combined Virtual/Biophysical Screening Approaches to Identify Ligands.  
*ChemMedChem*, 5, **2010**, 428-435.  
[doi: 10.1002/cmdc.200900393](https://doi.org/10.1002/cmdc.200900393)  
I.F. 3.306 Q1
7. M. T. Rubino, M. Agamennone, C. Campestre, G. Fracchiolla, A. Laghezza, F. Liodice, E. Nuti, A. Rossello, P. Tortorella,  
Synthesis, SAR and biological evaluation of alpha-sulfonylphosphonic acids as new selective matrix metalloproteinase inhibitors.  
*ChemMedChem*, 4, **2009**, 352-362.  
[doi: 10.1002/cmdc.200800324](https://doi.org/10.1002/cmdc.200800324)  
I.F. 3.232 Q1
6. C. Campestre, P. Tortorella, M. Agamennone, S. Preziuso, A. Biasone, E. Nuti, A. Rossello, C. Gallina.  
Peptidyl 3-substituted 1-hydroxyureas as isosteric analogues of succinylhydroxamate MMP inhibitors.  
*European Journal of Medicinal Chemistry*, 43, **2008**, 1008-14.  
[doi:10.1016/j.ejmech.2007.07.002](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2007.07.002)  
I.F. 2.882 Q2
5. A. Biasone, P. Tortorella, C. Campestre, M. Agamennone, S. Preziuso, M. Chiappini, E. Nuti, P. Carelli, A. Rossello, F. Mazza, C. Gallina,  
alpha-Biphenylsulfonylamino 2-methylpropyl phosphonates: enantioselective synthesis and selective inhibition of MMPs.  
*Bioorganic and Medicinal Chemistry* 15, **2007**, 791-9.  
[doi:10.1016/j.bmc.2006.10.047](https://doi.org/10.1016/j.bmc.2006.10.047)  
I.F. 2.662 Q2
4. C. Campestre, M. Agamennone, P. Tortorella, S. Preziuso, A. Biasone, E. Gavuzzo, G. Pochetti, F. Mazza, O. Hiller, H. Tschesche, V. Consalvi and C. Gallina,  
N-Hydroxyurea as zinc binding group in matrix metalloproteinase inhibition: Mode of binding in a complex with MMP-8.  
*Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* 16, **2006**, 20-24  
[doi:10.1016/j.bmcl.2005.09.057](https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2005.09.057)  
I.F. 2.538 Q2
3. G. Pochetti, E. Gavuzzo, C. Campestre, M. Agamennone, P. Tortorella, V. Consalvi, C. Gallina, O. Hiller, H. Tschesche, P. A. Tucker and F. Mazza,

Structural Insight into the Stereoselective Inhibition of MMP-8 by Enantiomeric Sulfonamide Phosphonates.

*J. Med. Chem.* **2006**, 49, 923-931

[doi:10.1021/jm050787+](https://doi.org/10.1021/jm050787+)

I.F. 5.115 Q1

2. A. Tafi, M. Agamennone, P. Tortorella, S. Alcaro, C. Gallina, M. Botta  
AMBER force field implementation of the boronate function to simulate the inhibition of beta-lactamases by alkyl and aryl boronic acids.

*European Journal of Medicinal Chemistry* 40, **2005**, 1134–1142

[doi:10.1016/j.ejmech.2005.06.011](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2005.06.011)

I.F. 2.022 Q2

1. M. Agamennone, C. Campestre, S. Prezioso, V. Consalvi, M. Crucianelli, F. Mazza, V. Politi, R. Ragno, P. Tortorella, C. Gallina,  
Synthesis and evaluation of new tripeptide phosphonate inhibitors of MMP-8 and MMP-2.

*European Journal of Medicinal Chemistry* 40, **2005**, 271–279,

[doi:10.1016/j.ejmech.2004.10.013](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2004.10.013)

I.F. 2.022 Q2