

## A. INFORMAZIONI PERSONALI

Lodola Alessio

Sito web istituzionale: <https://personale.unipr.it/it/ugovdocenti/person/16148>

Orcid: <http://orcid.org/0000-0002-8675-1002>

E-mail: [alessio.lodola@unipr.it](mailto:alessio.lodola@unipr.it)



### A1. PERCORSO FORMATIVO

- 2002: Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche conseguita presso l'Università degli Studi di Parma (110/110 e lode), discutendo la tesi “Applicazione di *HINT* nella determinazione dell’energia libera di legame di complessi proteina-ligando”. Relatore: Prof. Andrea Mozzarelli.
- 2006: Dottorato di Ricerca in Chimica Farmaceutica (XVIII ciclo, 2002-2005) presso l'Università degli Studi di Pavia discutendo la tesi “*Enzyme and Receptor Models in Drug Discovery*”. Relatore: Prof. Marco Mor.

### A2. CARRIERA ACCADEMICA

- 2005: Ricercatore per il settore Scientifico Disciplinare CHIM/08 presso la Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Parma.
- 2008-2013: Ricercatore confermato per il settore Scientifico Disciplinare CHIM/08 presso la Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Parma.
- 2014 - ottobre 2023: Professore di II Fascia per il settore Scientifico Disciplinare CHIM/08 presso il Dipartimento di Farmacia, poi divenuto Dipartimento di Scienze degli Alimenti e del Farmaco dell'Università degli Studi di Parma (<https://saf.unipr.it/it>).
- Da novembre 2023: Professore di I Fascia per il settore Scientifico Disciplinare CHIM/08 presso il Dipartimento di Scienze degli Alimenti e del Farmaco dell'Università degli Studi di Parma (<https://saf.unipr.it/it>).
- Dal 2020 ad oggi: *Visiting Professor* presso la School of Chemistry of the University of Bristol (<http://bristol.ac.uk/chemistry/research/>) Bristol, UK.

## B. ATTIVITA' DI RICERCA SCIENTIFICA

L’attività di ricerca del candidato è rivolta alla scoperta e ottimizzazione di composti biologicamente attivi ed allo studio e razionalizzazione di relazioni struttura-attività (SAR).

Il candidato applica tecniche di *computer-aided drug design* (modellistica molecolare, chemioinformatica) alla progettazione e sintesi di nuovi composti nell’ambito di progetti di chimica farmaceutica di ampio respiro riguardanti principalmente due aree terapeutiche, ovvero:

- **Agenti ad attività antinfiammatoria e neuroprotettiva**, con particolare riferimento alla progettazione di inibitori degli enzimi “Fatty acid amide hydrolase” (FAAH), e “N-acyl ethanolamine acid amidase” (NAAA), responsabili dell'idrolisi dell'endocannabinoide anandamide (AEA), e dell'agonista PPAR-alfa, palmitoiletanolamide (PEA).
- **Agenti ad attività antitumorale**, con particolare riferimento alla progettazione di inibitori covalenti del dominio chinasi di EGFR; e alla progettazione e caratterizzazione SAR di antagonisti non-peptidici del sistema delle efrine e dei loro recettori (primariamente il recettore EphA2).

L'attività di ricerca del candidato è anche rivolta alla messa a punto di **approcci computazionali** di *structure-based drug design* per applicazioni altamente rilevanti in ambito farmaceutico come:

- la predizione di proprietà termodinamiche e cinetiche di ligandi di recettori accoppiati a proteina G (GPCR) e di inibitori chinasi grazie a metodologie avanzate di *enhanced sampling* come la metadinamica.
- la caratterizzazione del meccanismo d'azione e l'ottimizzazione di agenti covalenti mediante tecniche computazionali derivate dalla quantomeccanica (approcci ibridi QM/MM).

## B1. PRODUZIONE SCIENTIFICA

Le attività di ricerca del Dott. Lodola si sono concretizzate in **116 pubblicazioni** su riviste "peer-reviewed" di rilievo internazionale, 8 capitoli di libro, e 2 editoriali. Il Dott. Lodola possiede i seguenti indicatori bibliometrici (fonte *Scopus*, accesso 26/06/2023); indice h di Hirsch (*h-index* = **36**); citazioni totali **> 3,600**.

L'analisi effettuata dall'**UO Monitoraggio Ricerca** dell'Università di Parma alla data del 26/06/2023, indica che l'*impact factor* (IF) totale del candidato relativo alla categoria “articoli su rivista” è pari a **721.5** nel caso in cui l'IF è riferito all'ultimo anno disponibile della rivista; è di **559.9** quando l'IF della rivista è riferito all'anno di pubblicazione dell'articolo.

Il candidato supera tutte e tre le mediane per la selezione dei Commissari per i Concorsi di I e II fascia nel Settore Concorsuale 03/D1 sulla base dei valori-soglia già definiti con il DM 589/2018:

- numero complessivo di articoli riportati nella domanda e pubblicati su riviste scientifiche contenute nella banca dati internazionale «Scopus» nei dieci anni precedenti (2014-2023): **66**; (soglia: 51)
- numero di citazioni ricevute dalla produzione scientifica contenuta nella domanda, e rilevata dalla banca dati internazionale «Scopus» nei quindici anni precedenti (2009-2023): **2696**; (soglia: 1407)
- l'indice h di Hirsch, calcolato sulla base delle citazioni rilevate nella banca dati internazionale «Scopus» con riferimento alle pubblicazioni contenute nella domanda e pubblicate nei quindici anni precedenti: **33** (soglia 22).

## B2. PARTECIPAZIONE COME RELATORE A CONVEGNI IN ITALIA O ALL'ESTERO (dal 2013)

- *"Computer-Aided Discovery of EGFR Inhibitors Overcoming C797S Mutation"* **Computational Advances in Drug Discovery (SBDD-2023)** Sestri Levante, Italy, 2-4 Maggio, 2023 (su invito).
- *"Free-energy simulation for the design of covalent inhibitors"*. **Trends in Enzyme Catalysis** Benicassim, Spain, 1-2 Dicembre, 2022 (su invito).
- *"Multiscale simulations at the interface between chemical biology and drug design"* **Frontiers in Computer Aided Drug Design - Pacificchem 2021**, 16-21 Dicembre 2021, Honolulu, Hawaii, USA (Virtual Meeting; su invito).
- *"Multiscale simulations for covalent drug design"*. **24<sup>th</sup> International Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE)** Kasetsart University, Kamphaeng Saen Campus, Nakhon Pathom Thailand, 28-30 Aprile 2021 (Virtual Meeting; su invito).
- *"Enzyme inhibitor design driven by free-energy simulations"* **Computational Advances in Drug Discovery (SBDD-2019)** Sestri Levante, Italy, 23-26 Settembre, 2019 (Keynote lecture su invito)
- *"Exploiting QM/MM based-simulations in Drug Design"* **Trends in Enzyme Catalysis** Benicassim, Spain, 29-30 Novembre, 2018 (su invito).
- *"Design of EGFR covalent inhibitors by QM/MM mechanistic modelling"* **Modeling and Design of Molecular Materials 2018**, Polanica Zdrój, Poland, 24-28 Giugno, 2018 (su invito).
- *"Metadynamics Simulations for rational drug design"* **Computational Advances in Drug Discovery (SBDD-2017)**, 5-8 Settembre, 2017, Lausanne, Switzerland (su invito).
- *"Ranking RTK inhibitor residence times with metadynamics: a successful story"* **Schrödinger User Meeting 21 – 23 Settembre, 2016, London, UK** (su invito)
- *"Designing better ligands with Metadynamics."* **Gordon Research Conference in Computational Chemistry**, 24-29 Luglio, 2016, Girona, Spain (su invito).
- *"Insights into the mechanism of EGFR covalent inhibition by QM/MM and enhanced sampling approaches."* **Modeling and Design of Molecular Materials**, 29 Giugno – 3 Luglio, 2014, Kudowa-Droj, Poland. (su invito).
- *"Design and Optimization of Covalent Inhibitors of N-Acetylglycyl-L-homoserine Sulfonamide (NAGS), a Novel Target for the Treatment of Inflammatory States"* **Ninth European Workshop in Drug Design**, 19-25 maggio 2013 – Certosa di Pontignano, Siena, Italy (su invito).
- *"Computer-Aided Design of Novel Antagonists of the EphA2 Receptor"*. **Innovative Approaches to Computational Drug Discovery** 1-3 Ottobre, 2013 – CECAM, Lausanne, Switzerland (su invito).
- *"Structure-activity relationships and mechanism of action of Eph–ephrin antagonists as example of protein-protein modulators."* **Innovation in medicinal chemistry: from biomass to safe and potent drug candidates** 9-13 Settembre, 2013 – Parkhotel Beau-Site Zermatt, Switzerland. (su invito).

### B3. ORGANIZZAZIONE DI CONVEGNI DI CARATTERE SCIENTIFICO IN ITALIA O ALL'ESTERO

- Responsabile scientifico e organizzativo del convegno internazionale “**First Congress on the Eph/ephrin System**”, evento promosso dalla Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, tenutosi a Parma dal 5 al 6 Maggio 2016;
- Responsabile scientifico e organizzativo del convegno internazionale “**Second Congress on the Eph/ephrin System**”, tenutosi a Parma dal 3 al 4 Maggio 2018;
- Membro della commissione organizzatrice del congresso internazionale **21<sup>st</sup> European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationship (EuroQSAR 2016)** tenutosi dal 4 all'8 Settembre 2016, presso l'azienda Aptuit di Verona;
- Membro della commissione scientifica del **12<sup>th</sup> European Workshop in Drug Design**, tenutosi a Siena (Certosa di Pontignano) dal 19 al 24 maggio 2019.

### B.4 ATTRIBUZIONE DI INCARICHI DI RICERCA (FELLOWSHIP) PRESSO QUALIFICATI ATENEI E ISTITUTI DI RICERCA ESTERI O SOVRANAZIONALI

- **Visiting Scientist** (2006, 2007) presso la *School of Chemistry, University of Bristol (UK)* nel gruppo di chimica computazionale del Prof. Adrian Mulholland.
- **Ricercatore in Visita** (2008) e **Consulente Scientifico** (2009-2011), presso il *Drug Discovery and Development (D3) Department* dell'Istituto Italiano di Tecnologia in Genova, sotto la direzione del Prof. Daniele Piomelli.
- Dal 2013 al 2016 è stato **Visiting Fellow** presso la *Faculty of Health and Life Sciences* della *Northumbria University*, Newcastle, UK (Referente Prof. Christo Christov) per svolgere attività di ricerca nel campo dell'inibizione dell'enzima COX-2.
- Dal 2020 è **Visiting Professor** presso la *School of Chemistry of University of Bristol*, Bristol, UK, (Referente Prof. Adrian Mulholland) per svolgere attività di ricerca nel campo dell'inibizione dell'enzima *main protease* M<sup>PRO</sup> espressa da SARS-COV-2.

## C. ATTIVITA' DIDATTICA

Il candidato svolge attività didattica frontale in modo continuativo dal 2006 nell'ambito di insegnamenti del settore scientifico-disciplinare CHIM/08 oltre a partecipare all'organizzazione delle attività didattiche del Dipartimento operando all'interno di organi accademici o in comitati di gestione.

### C.1 GESTIONE DELLA DIDATTICA

Nello specifico, il candidato è o è stato:

- **Presidente del Consiglio di Corso di Studio per il Corso di Laurea Magistrale a Ciclo Unico in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche** (<https://corsi.unipr.it/it/cdlm-ctf/organizzazione-del-corso>) presso l'Università di Parma (da Gennaio 2022 ad oggi)
- **Coordinatore della Commissione Mobilità Internazionale** per il Dipartimento di Scienze degli Alimenti e del Farmaco dell'Università degli Studi di Parma (Marzo 2020 – Dicembre 2021).
- **Presidente della Commissione per l'Esame di Stato di Abilitazione all'Esercizio della Professione di Farmacista** (I sessione 2015), presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università di Parma.
- **Coordinatore e Responsabile didattico della Scuola di Alta Formazione in Ricerca e Sviluppo del Farmaco** (<https://www.pharmasummerschool.unipr.it/>) incardinata presso il Dipartimento di Scienze degli Alimenti e del Farmaco per il triennio 2021-2023 e supportata dalla Divisione di Chimica Farmaceutica della SCI. La realizzazione della scuola è stata possibile grazie alla vittoria di un bando competitivo finanziato dalla regione Emilia-Romagna intitolato *“Progetti di Alta Formazione In Ambito Tecnologico Economico e Culturale per una Regione della Conoscenza Europea e Attrattiva”*.

### C.2 PARTECIPAZIONE AL COLLEGIO DEI DOCENTI OVVERO ATTRIBUZIONE DI INCARICHI DI INSEGNAMENTO, NELL'AMBITO DI DOTTORATI DI RICERCA ACCREDITATI DAL MINISTERO

- Membro del Collegio dei docenti del **Dottorato in Progettazione e Sintesi di Composti Biologicamente Attivi** dell'Università degli Studi di Parma (dal 2008 al 2012).
- Membro del Collegio dei docenti del **Dottorato in Scienze del Farmaco, delle Biomolecole e dei Prodotti della Salute** dell'Università degli Studi di Parma (dal 2013 al 2018).
- Membro del Collegio dei docenti del **Dottorato in Scienze del Farmaco** (dal 2019 ad oggi).
- Dal 2019 docente dell'insegnamento *Introduction to Scientific Communication* per il **Dottorato in Scienze del Farmaco**.
- E' stato supervisore di numerosi studenti di Dottorato.

### C.3 FORMALE ATTRIBUZIONE DI INCARICHI DI INSEGNAMENTO PRESSO QUALIFICATI ATENEI E ISTITUTI DI RICERCA ESTERI O SOVRANAZIONALI

- Il candidato è titolare (o è stato titolare) dei seguenti insegnamenti presso l'Università di Parma:
  - **Laboratorio di Progettazione dei Farmaci** (5 CFU; da AA 2018/2019 ad oggi)  
Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche
  - **Laboratorio di Sintesi dei Farmaci** (5 CFU; da AA 2014/2015 ad oggi)

Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche

- **Fondamenti di Chimica Farmaceutica** (6 CFU; da AA 2015/2016 ad AA 2018/2019)

Corso di Laurea Magistrale in Biotecnologie Industriali

- **Analisi dei Medicinali** (8 CFU; da AA 2006/2007 ad AA 2013/2014)

Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.

- Dal 2021 Il candidato è Docente dell'insegnamento di "*Computer-Aided Drug Design*" (1 CFU) per il Master di II° Livello in *Drug Design & Synthesis (MDSS)*, organizzato dall'Università di Siena.
- Dal 2023 il candidato è del Docente dell'insegnamento di "*Molecular Models for Drug Discovery Applications*" per il Corso di Dottorato in Scienze Farmaceutiche presso l'Università di Milano.
- Il candidato è *course leader* di insegnamenti per il la scuola estiva di dottorato organizzata da ULLA (<http://www.ullapharmsci.org/>), un consorzio Europeo per l'alta formazione nelle Scienze del Farmaco.
  - 2022 **Computer-Aided Drug Design** course (1 CFU), ULLA Postgraduate Summer School, University of Uppsala, Uppsala, Sweden
  - 2019 **Computer-Aided Drug Design** course (1 CFU), ULLA Postgraduate Summer School, University of Helsinki, Helsinki, Finland
  - 2017 **Computer-Aided Drug Design** course (1 CFU), ULLA Postgraduate Summer School, University of Leuven, Leuven, Belgium.
  - 2015 **Computer-Aided Drug Design** course (1 CFU), ULLA Postgraduate Summer School, University of Paris Sud, Paris, France.
  - 2011 **Computer-Aided Drug Design** course (1 CFU), ULLA Postgraduate Summer School, University of Parma, Parma, Italy.
  - 2009 **Computer-Aided Drug Design** course (1 CFU), ULLA Postgraduate Summer School, University of Copenhagen, Copenhagen, Denmark.
- Il candidato ha tenuto numerosi seminari nell'ambito dei programmi di visita svolti a Newcastle (Northumbria University) e a Bristol (University of Bristol).

#### C4. ATTIVITÀ DI SERVIZIO AGLI STUDENTI

- A partire dall'anno accademico 2006-2007, il candidato ha svolto attività di ricevimento e di servizio per gli studenti, nell'ambito di tutti i corsi di cui è stato titolare.
- A partire dall'anno accademico 2006-2007, il candidato ha fatto parte di Commissioni per gli esami di profitto e di Laurea dei corsi di insegnamento/laurea in cui ha svolto attività didattica.
- Il candidato è stato relatore di numerose tesi di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche e Farmacia.
- A partire dal 2021 il candidato è stato Presidente di numerose Commissioni per gli esami di Laurea nell'ambito del corso di studio in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.

## D. PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE SU RIVISTA

### • Elenco degli articoli su riviste a diffusione internazionale

#### ANNO - 2023

1. Papa A, Pasquini S, Galvani F, Cammarota M, Contri C, Carullo G, Gemma S, Ramunno A, Lamponi S, Gorelli B, Saponara S, Varani K, Mor M, Campiani G, Boscia F, Vincenzi F, **Lodola A**, Butini S. Development of potent and selective FAAH inhibitors with improved drug-like properties as potential tools to treat neuroinflammatory conditions. *Eur J Med Chem.* **2023**, 246:114952. doi: 10.1016/j.ejmech.2022.114952.
2. Galvani F, Pala D, Cuzzolin A, Scalvini L, **Lodola A**, Mor M, Rizzi A. Unbinding Kinetics of Muscarinic M3 Receptor Antagonists Explained by Metadynamics Simulations. *J Chem Inf Model.* **2023**, 63:2842-2856. doi: 10.1021/acs.jcim.3c00042.
3. Ferrari FR, Giorgio C, Zappia A, Ballabeni V, Bertoni S, Barocelli E, Scalvini L, Galvani F, Mor M, **Lodola A**, Tognolini M. Pharmacological characterization of second generation FXR agonists as effective EphA2 antagonists: A successful application of target hopping approach. *Biochem Pharmacol.* **2023**, 209:115452. doi: 10.1016/j.bcp.2023.115452.
4. Arafet K, Scalvini L, Galvani F, Martí S, Moliner V, Mor M, **Lodola A**. Mechanistic Modeling of Lys745 Sulfonylation in EGFR C797S Reveals Chemical Determinants for Inhibitor Activity and Discriminates Reversible from Irreversible Agents. *J Chem Inf Model.* **2023**, 63:1301-1312. doi: 10.1021/acs.jcim.2c01586.

#### ANNO - 2022

5. Rusnati M, Paiardi G, Tobia C, Urbinati C, **Lodola A**, D'Ursi P, Corrado M, Castelli R, Wade RC, Tognolini M, Chiodelli P. Cholenic acid derivative UniPR1331 impairs tumor angiogenesis via blockade of VEGF/VEGFR2 in addition to Eph/ephrin. *Cancer Gene Ther.* **2022**, 29:908-917. doi: 10.1038/s41417-021-00379-5.
6. Galvani F, Scalvini L, Rivara S, **Lodola A**, Mor M. Mechanistic Modeling of Monoglyceride Lipase Covalent Modification Elucidates the Role of Leaving Group Expulsion and Discriminates Inhibitors with High and Low Potency. *J Chem Inf Model.* **2022**, 62, 2771-2787. doi: 10.1021/acs.jcim.2c00140.
7. Guidetti L, Castelli R, Scalvini L, Ferlenghi F, Corrado M, Giorgio C, Tognolini M, **Lodola A**. Protein-Protein Interaction Inhibitors Targeting the Eph-Ephrin System with a Focus on Amino Acid Conjugates of Bile Acids. *Pharmaceuticals (Basel)* **2022**, 15, 137. doi: 10.3390/ph15020137.
8. Elisi GM, Scalvini L, **Lodola A**, Mor M, Rivara S. Free-Energy Simulations Support a Lipophilic Binding Route for Melatonin Receptors. *J Chem Inf Model.* **2022**, 62, 210-222. doi: 10.1021/acs.jcim.1c01183.
9. Martí S, Arafet K, **Lodola A**, Mulholland AJ, Świderek K, Moliner V. Impact of Warhead Modulations on the Covalent Inhibition of SARS-CoV-2 Mpro Explored by QM/MM Simulations. *ACS Catal.* **2022** 12, 698-708. doi: 10.1021/acscatal.1c04661.
10. Elisi GM, Scalvini L, **Lodola A**, Bedini A, Spadoni G, Rivara S. In silico drug discovery of melatonin receptor ligands with therapeutic potential. *Expert Opin Drug Discov.* **2022**, 17, 343-354. doi: 10.1080/17460441.2022.2043846.
11. Ferlenghi F, Giorgio C, Incerti M, Guidetti L, Chiodelli P, Rusnati M, Tognolini M, Vacondio F, Mor M, **Lodola A**. Metabolic Soft Spot and Pharmacokinetics: Functionalization of C-3 Position of an Eph-Ephrin Antagonist Featuring a Bile Acid Core as an Effective Strategy to Obtain Oral Bioavailability in Mice. *Pharmaceuticals (Basel)*. **2022** 15, 41. doi: 10.3390/ph15010041.

#### ANNO - 2021

12. Diotallevi A, Scalvini L, Buffi G, Pérez-Pertejo Y, De Santi M, Verboni M, Favi G, Magnani M, **Lodola A**, Lucarini S, Galluzzi L. Phenotype Screening of an Azole-bisindole Chemical Library Identifies URB1483 as a New Antileishmanial Agent Devoid of Toxicity on Human Cells. *ACS Omega.* **2021**, 6, 35699-35710. doi: 10.1021/acsomega.1c05611.
13. Ferlenghi F, Scalvini L, Vacondio F, Castelli R, Bozza N, Marseglia G, Rivara S, **Lodola A**, La Monica S, Minari R, Petronini PG, Alfieri R, Tiseo M, Mor M. A sulfonyl fluoride derivative inhibits EGFR<sup>L858R/T790M/C797S</sup> by covalent modification of the catalytic lysine. *Eur J Med Chem.* **2021**, 225, 113786. doi: 10.1016/j.ejmech.2021.113786.
14. Chan HTH, Moesser MA, Walters RK, Malla TR, Twidale RM, John T, Deeks HM, Johnston-Wood T, Mikhailov V, Sessions RB, Dawson W, Salah E, Lukacik P, Strain-Damerell C, Owen CD, Nakajima T, Świderek K, **Lodola A**, Moliner V, Glowacki DR, Spencer J, Walsh MA, Schofield CJ, Genovese L, Shoemark DK, Mulholland AJ, Duarte F, Morris GM. Discovery of SARS-CoV-2 Mpro peptide inhibitors from modelling substrate and ligand binding. *Chem Sci.* **2021**, 12, 13686-13703. doi: 10.1039/d1sc03628a.

15. Ieguchi K, Tomita T, Takao T, Omori T, Mishima T, Shimizu I, Tognolini M, **Lodola A**, Tsunoda T, Kobayashi S, Wada S, Maru Y. Analysis of ADAM12-Mediated Ephrin-A1 Cleavage and Its Biological Functions. *Int J Mol Sci*. **2021**;22(5):2480. doi: 10.3390/ijms22052480.
16. Arafet K, Serrano-Aparicio N, **Lodola A**, Mulholland AJ, Swiderek K, Moliner V. Mechanism of inhibition of SARS-CoV-2 Mpro by N3 peptidyl Michael acceptor explained by QM/MM simulations and design of new derivatives with tunable chemical reactivity. *Chem Sci*, **2021**, 12, 1433–1444. doi: 10.1039/d0sc06195f.
17. Ghidini A, Scalvini L, Palese F, **Lodola A**, Mor M, Piomelli D. Different roles for the acyl chain and the amine leaving group in the substrate selectivity of N-Acylethanolamine acid amidase. *J Enzyme Inhib Med Chem*. **2021**, 36, 1411-1423. doi: 10.1080/14756366.2021.1912.
18. Giorgio C, Allodi M, Palese S, Grandi A, Tognolini M, Castelli R, Lodola A, Flammini L, Cantoni AM, Barocelli E, Bertoni S. UniPR1331: Small Eph/Ephrin Antagonist Beneficial in Intestinal Inflammation by Interfering with Type-B Signaling. *Pharmaceuticals (Basel)*. **2021**, 14, 502. doi: 10.3390/ph14060502.

#### ANNO - 2020

19. Scalvini L, Ghidini A, Callegari D, **Lodola A**, Rivara S, Piomelli D, Mor M. N-Acylethanolamine Acid Amidase (NAAA): Mechanism of Palmitoylethanolamide Hydrolysis Revealed by Mechanistic Simulations. *ACS Catal*. **2020**; 10:11797. doi: 10.1021/acscatal.0c02903.
20. Piomelli D, Scalvini L, Fotio Y, **Lodola A**, Spadoni G, Tarzia G, Mor M. N-Acylethanolamine Acid Amidase (NAAA): Structure, Function, and Inhibition. *J Med Chem*. **2020**;63(14):7475-7490. doi: 10.1021/acs.jmedchem.0c00191.
21. Giorgio C, Zanotti I, **Lodola A**, Tognolini M. Ephrin or not? Six tough questions on Eph targeting. *Expert Opin Ther Targets*. **2020** May;24(5):403-415. doi: 10.1080/14728222.2020.1745187.
22. Corrado M, Giorgio C, Barocelli E, Marzetti GV, Cantoni AM, Di Lecce R, Incerti M, Castelli R, **Lodola A**, Tognolini M. Evaluation of the Anti-Tumor Activity of Small Molecules Targeting Eph/Ephrins in APC min/J Mice. *Pharmaceuticals* **2020**;13(4):69. doi: 10.3390/ph13040069.
23. Incerti M, Russo S, Corrado M, Giorgio C, Ballabeni V, Chiodelli P, Rusnati M, Scalvini L, Callegari D, Castelli R, Vacondio F, Ferlenghi F, Tognolini M, **Lodola A**. Optimization of EphA2 antagonists based on a lithocholic acid core led to the identification of UniPR505, a new 3 $\alpha$ -carbamoyloxy derivative with antiangiogenic properties. *Eur J Med Chem*. **2020**; 189:112083. doi: 10.1016/j.ejmech.2020.112083.
24. Ferlenghi F, Castelli R, Scalvini L, Giorgio C, Corrado M, Tognolini M, Mor M, **Lodola A**, Vacondio F. Drug-gut microbiota metabolic interactions: the case of UniPR1331, selective antagonist of the Eph-ephrin system, in mice. *J Pharm Biomed Anal*. **2020**; 180:113067. doi: 10.1016/j.jpba.2019.113067.
25. Castelli R, Scalvini L, Vacondio F, **Lodola A**, Anselmi M, Vezzosi S, Carmi C, Bassi M, Ferlenghi F, Rivara S, Møller IR, Rand KD, Daglian J, Wei D, Dotsey EY, Ahmed F, Jung KM, Stella N, Singh S, Mor M, Piomelli D. Benzisothiazolinone Derivatives as Potent Allosteric Monoacylglycerol Lipase Inhibitors That Functionally Mimic Sulfenylation of Regulatory Cysteines. *J Med Chem*. **2020**;63(3):1261-1280. doi: 10.1021/acs.jmedchem.9b01679.
26. Pala D, Scalvini L, Elisi GM, **Lodola A**, Mor M, Spadoni G, Ferrara FF, Pavoni E, Roscilli G, Milazzo FM, Battistuzzi G, Rivara S, Giannini G. New classes of potent heparanase inhibitors from ligand-based virtual screening. *J Enzyme Inhib Med Chem*. **2020**; 35(1):1685-1696. doi: 10.1080/14756366.2020.1811701.

#### ANNO - 2019

27. Castelli R, Bozza N, Cavazzoni A, Bonelli M, Vacondio F, Ferlenghi F, Callegari D, Silva C, Rivara S, **Lodola A**, Digiaco G, Fumarola C, Alfieri R, Petronini PG, Mor M. Balancing reactivity and antitumor activity: heteroarylthioacetamide derivatives as potent and time-dependent inhibitors of EGFR. *Eur J Med Chem*. **2019**; 162:507-524. doi: 10.1016/j.ejmech.2018.11.029.
28. Fumarola C, Bozza N, Castelli R, Ferlenghi F, Marseglia G, **Lodola A**, Bonelli M, La Monica S, Cretella D, Alfieri R, Minari R, Galetti M, Tiseo M, Ardizzoni A, Mor M, Petronini PG. Expanding the Arsenal of FGFR Inhibitors: A Novel Chloroacetamide Derivative as a New Irreversible Agent with Anti-proliferative Activity Against FGFR1-Amplified Lung Cancer Cell Lines. *Front Oncol*. **2019**; 9:179. doi: 10.3389/fonc.2019.00179.
29. Grandi A, Zini I, Palese S, Giorgio C, Tognolini M, Marchesani F, Bruno S, Flammini L, Cantoni AM, Castelli R, **Lodola A**, Fusari A, Barocelli E, Bertoni S. Targeting the Eph/Ephrin System as Anti-Inflammatory Strategy in IBD. *Front Pharmacol*. **2019**;10:691 doi: 10.3389/fphar.2019.00691.
30. Marseglia G, **Lodola A**, Mor M, Castelli R. Fibroblast growth factor receptor inhibitors: patent review (2015-2019). *Expert Opin Ther Pat*. **2019**;29(12):965-977.
31. Giorgio C, Incerti M, Pala D, Russo S, Chiodelli P, Rusnati M, Cantoni AM, Di Lecce R, Barocelli E, Bertoni S, Ravassard P, Manenti F, Piemonti L, Ferlenghi F, **Lodola A**, Tognolini M. Inhibition of Eph/ephrin interaction



with the small molecule UniPR500 improves glucose tolerance in healthy and insulin-resistant mice. *Pharmacol Res.* **2019**, 141:319-330. doi: 10.1016/j.phrs.2019.01.011.

32. Grandi A, Zini I, Palese S, Giorgio C, Tognolini M, Marchesani F, Bruno S, Flammini L, Cantoni AM, Castelli R, **Lodola A**, Fusari A, Barocelli E, Bertoni S. Targeting the Eph/Ephrin System as Anti-Inflammatory Strategy in IBD. *Front Pharmacol.* **2019**; 10:691. doi: 10.3389/fphar.2019.00691.

#### ANNO - 2018

33. Ainsley J, **Lodola A**, Mulholland AJ, Christov CZ, Karabenchewa-Christova TG. Combined Quantum Mechanics and Molecular Mechanics Studies of Enzymatic Reaction Mechanisms. *Adv Protein Chem Struct Biol.* **2018**; 113:1-32. doi: 10.1016/bs.apcsb.2018.07.001
34. Jedwabny W, **Lodola A**, Dyguda-Kazimierowicz E. Theoretical Model of EphA2-Ephrin A1 Inhibition. *Molecules.* **2018**, 23, pii: E1688. doi: 10.3390/molecules23071688.
35. Spadoni G, Bedini A, Furiassi L, Mari M, Mor M, Scalvini L, **Lodola A**, Ghidini A, Lucini V, Dugnani S, Scaglione F, Piomelli D, Jung KM, Supuran CT, Lucarini L, Durante M, Sgambellone S, Masini E, Rivara S. Identification of Bivalent Ligands with Melatonin Receptor Agonist and Fatty Acid Amide Hydrolase (FAAH) Inhibitory Activity That Exhibit Ocular Hypotensive Effect in the Rabbit. *J Med Chem.* **2018** 61:7902-7916. doi: 10.1021/acs.jmedchem.8b00893.
36. Callegari D, Ranaghan KE, Woods CJ, Minari R, Tiseo M, Mor M, Mulholland AJ, **Lodola A**. L718Q mutant EGFR escapes covalent inhibition by stabilizing a non-reactive conformation of the lung cancer drug osimertinib. *Chem. Sci.*, **2018**, 9, 2740-2749 doi: 10.1039/C7SC04761D.
37. Festuccia C, Gravina GL, Giorgio C, Mancini A, Pellegrini C, Colapietro A, Delle Monache S, Maturo MG, Sferra R, Chiodelli P, Rusnati M, Cantoni A, Castelli R, Vacondio F, **Lodola A**, Tognolini M. UniPR1331, a small molecule targeting Eph/ephrin interaction, prolongs survival in glioblastoma and potentiates the effect of antiangiogenic therapy in mice. *Oncotarget.* **2018**, 9:24347-24363. doi: 10.18632/oncotarget.25272
38. Rivara S, Scalvini L, **Lodola A**, Mor M, Caignard DH, Delagrangé P, Collina S, Lucini V, Scaglione F, Furiassi L, Mari M, Lucarini S, Bedini A, Spadoni G. Tetrahydroquinoline ring as a versatile bioisostere of tetralin for melatonin receptor ligands. *J Med Chem.* **2018**. doi: 10.1021/acs.jmedchem.8b00359.
39. Giorgio C, Incerti M, Corrado M, Rusnati M, Chiodelli P, Russo S, Callegari D, Ferlenghi F, Ballabeni V, Barocelli E, **Lodola A**, Tognolini M. Pharmacological evaluation of new bioavailable small molecules targeting Eph/ephrin interaction. *Biochem Pharmacol.* **2018**; 147:21-29. doi: 10.1016/j.bcp.2017.11.002.
40. Nawaz IM, Chiodelli P, Rezzola S, Paganini G, Corsini M, **Lodola A**, Di Ianni A, Mor M, Presta M. N-tert-butylloxycarbonyl-Phe-Leu-Phe-Leu-Phe (BOC2) inhibits the angiogenic activity of heparin-binding growth factors. *Angiogenesis* **2018**;21(1):47-59. doi: 10.1007/s10456-017-9581-6.

#### ANNO - 2017

41. **Lodola A**, Giorgio C, Incerti M, Zanotti I, Tognolini M. Targeting Eph/ephrin system in cancer therapy. *Eur J Med Chem.* **2017** Dec 15;142:152-162. doi: 10.1016/j.ejmech.2017.07.029.
42. **Lodola A**, Bertolini S, Biagetti M, Capacchi S, Facchinetti F, Gallo PM, Pappani A, Mor M, Pala D, Rivara S, Visentini F, Corsi M, Capelli AM. Atropisomerism and Conformational Equilibria: Impact on PI3K $\delta$  Inhibition of 2-((6-Amino-9H-purin-9-yl)methyl)-5-methyl-3-(o-tolyl)quinazolin-4(3H)-one (IC87114) and Its Conformationally Restricted Analogs. *J Med Chem.* **2017** May 25;60(10):4304-4315. doi: 10.1021/acs.jmedchem.7b00247.
43. Karabenchewa-Christova TG, Torras J, Mulholland AJ, **Lodola A**, Christov CZ. Mechanistic Insights into the Reaction of Chlorination of Tryptophan Catalyzed by Tryptophan 7-Halogenase. *Sci Rep.* **2017** Dec 12;7(1):17395. doi: 10.1038/s41598-017-17789-x.
44. Callegari D, **Lodola A**, Pala D, Rivara S, Mor M, Rizzi A, Capelli AM. Metadynamics Simulations Distinguish Short- and Long-Residence-Time Inhibitors of Cyclin-Dependent Kinase 8. *J Chem Inf Model.* **2017**;57(2):159-169. doi: 10.1021/acs.jcim.6b00679.
45. Incerti M, Russo S, Callegari D, Pala D, Giorgio C, Zanotti I, Barocelli E, Vicini P, Vacondio F, Rivara S, Castelli R, Tognolini M, **Lodola A**. Metadynamics for Perspective Drug Design: Computationally Driven Synthesis of New Protein-Protein Interaction Inhibitors Targeting the EphA2 Receptor. *J Med Chem.* **2017** ; 60(2):787-796. doi: 10.1021/acs.jmedchem.6b01642.

#### ANNO - 2016

46. Russo S, Callegari D, Incerti M, Pala D, Giorgio C, Brunetti J, Bracci L, Vicini P, Barocelli E, Capoferri L, Rivara S, Tognolini M, Mor M, **Lodola A**. Exploiting Free-Energy Minima to Design Novel EphA2 Protein-Protein Antagonists: From Simulation to Experiment and Return. *Chemistry* **2016**, 22, 8048-8052. doi: 10.1002/chem.201600993.

47. Scalvini L, Vacondio F, Bassi M, Pala D, **Lodola A**, Rivara S, Jung KM, Piomelli D, Mor M. Free-energy studies reveal a possible mechanism for oxidation-dependent inhibition of MGL. *Sci Rep*. **2016**, 6:31046.
48. Tarozzi A, Marchetti C, Nicolini B, D'Amico M, Ticchi N, Pruccoli L, Tumiatto V, Simoni E, **Lodola A**, Mor M, Milelli A, Minarini A Combined inhibition of the EGFR/AKT pathways by a novel conjugate of quinazoline with isothiocyanate. *Eur J Med Chem*. **2016** 117, 283-291. doi: 10.1016/j.ejmech.2016.04.002.
49. Giorgio C, Russo S, Incerti M, Bugatti A, Vacondio F, Barocelli E, Mor M, Pala D, Hassan-Mohamed I, Gioiello A, Rusnati M, **Lodola A**, Tognolini M. Biochemical characterization of EphA2 antagonists with improved physico-chemical properties by cell-based assays and surface plasmon resonance analysis. *Biochem Pharmacol*, **2016**, 99, 18-30. doi: 10.1016/j.bcp.2015.10.006.

#### ANNO - 2015

50. **Lodola A**, Castelli R, Mor M, Rivara S. Fatty acid amide hydrolase inhibitors: a patent review (2009-2014). *Expert Opin Ther Pat*. **2015**;25, 1247-1266. doi: 10.1517/13543776.2015.
51. Callegari D, Pala D, Scalvini L, Tognolini M, Incerti M, Rivara S, Mor M, **Lodola A**. Comparative analysis of virtual screening approaches in the search for novel EphA2 receptor antagonists. *Molecules*, **2015**, 20, 17132-17151. doi: 10.3390/molecules200917132.
52. Giorgio C, Mena P, Del Rio D, Brighenti F, Barocelli E, Hassan-Mohamed I, Callegari D, **Lodola A**, Tognolini M. The ellagitannin colonic metabolite urolithin D selectively inhibits EphA2 phosphorylation in prostate cancer cells. *Mol Nutr Food Res* **2015**, doi: 10.1002/mnfr.201500470
53. Spadoni G, Bedini A, Lucarini S, Mari M, Caignard DH, Boutin JA, Delagrè P, Lucini V, Scaglione F, **Lodola A**, Zanardi F, Pala D, Mor M, Rivara S. Highly potent and selective MT2 melatonin receptor full agonists from conformational analysis of tetrahydroquinoline derivatives. *J Med Chem*. **2015**, 58, 7512-7525. doi: 10.1021/acs.jmedchem.5b01066.
54. Tognolini M, **Lodola A**. Targeting the Eph-ephrin system with protein-protein interaction (PPI) inhibitors. *Curr Drug Targets*. **2015**, 6, 1048-1056.
55. Castelli R, Tognolini M, Vacondio F, Incerti M, Pala D, Callegari D, Bertoni S, Carmine G, Hassan-Mohamed I, Zanotti I, Bugatti A, Rusnati M, Festuccia C, Rivara S, Barocelli E; Mor M, **Lodola A**.  $\Delta^5$ -Cholenoyl-Amino Acids as Selective and Orally Available Antagonists of the Eph-ephrin System. *Eur J Med Chem*. **2015**, doi: 10.1016/j.ejmech.2015.08.048.
56. Vacondio F, Bassi M, Silva C, Castelli R, Carmi C, Scalvini L, **Lodola A**, Vivo V, Flammini L, Barocelli E, Mor M, Rivara S Amino Acid Derivatives as Palmitoylethanolamide Prodrugs: Synthesis, In Vitro Metabolism and In Vivo Plasma Profile in Rats. *PLoS One*. **2015** 10:e0128699. doi: 10.1371/journal.pone.0128699.
57. Curti C, Sartori A, Battistini L, Brindani N, Rassu G, Pelosi G, **Lodola A**, Mor M, Casiraghi G, Zanardi F. Pushing the boundaries of vinylogous reactivity: catalytic enantioselective mukaiyama aldol reactions of highly unsaturated 2-silyloxyindoles. *Chemistry*. **2015**, 21, 6433-6442. doi: 10.1002/chem.201500083.
58. Capoferri L, **Lodola A**, Rivara S, Mor M. Quantum mechanics/molecular mechanics modeling of covalent addition between EGFR-cysteine 797 and N-(4-anilinoquinazolin-6-yl) acrylamide. *J Chem Inf Model*. **2015**, 55, 589-599. doi: 10.1021/ci500720e.

#### ANNO - 2014

59. Pala D, Scalvini L, **Lodola A**, Mor M, Flammini L, Barocelli E, Lucini V, Scaglione F, Bartolucci S, Bedini A, Rivara S, Spadoni G. Synthesis and characterization of new bivalent agents as melatonin- and histamine H3-ligands. *Int J Mol Sci*. **2014**, 15, 16114-16133. doi: 10.3390/ijms150916114.
60. **Lodola A**, Incerti M, Tognolini M. On the use of 2,5-dimethyl-pyrrol-1-yl-benzoic acid derivatives as EPH-ephrin antagonists. *J Virol*. **2014**; 88, 12173. doi: 10.1128/JVI.02152-14.
61. Pala D, Castelli R, Incerti M, Russo S, Tognolini M, Giorgio C, Hassan-Mohamed I, Zanotti I, Vacondio F, Rivara S, Mor M, **Lodola A**. Combining ligand- and structure-based approaches for the discovery of new inhibitors of the EPHA2-ephrin-A1 interaction. *J Chem Inf Model*. **2014**; 54, 2621-2626. doi: 10.1021/ci5004619.
62. Tognolini M, Incerti M, **Lodola A**. Are we using the right pharmacological tools to target EphA4? *ACS Chem Neurosci*. **2014**, 5, 1146-47. doi: 10.1021/cn500285h.
63. Giedroyc-Piasecka W, Dyguda-Kazimierowicz E, Beker W, Mor M, **Lodola A**, Sokalski WA. Physical Nature of Fatty Acid Amide Hydrolase Interactions with Its Inhibitors: Testing a Simple Nonempirical Scoring Model. *J Phys Chem B*. **2014**, 118, 14727-14736. doi: 10.1021/jp5059287.
64. Hassan-Mohamed I, Giorgio C, Incerti M, Russo S, Pala D, Pasquale EB, Vicini P, Barocelli E, Rivara S, Mor M, **Lodola A**, Tognolini M. UniPR129 is a competitive small molecule Eph-ephrin antagonist blocking in vitro angiogenesis at low micromolar concentrations. *Br. J. Pharmacol*. **2014**. doi: 10.1111/bph.12669

65. Berteotti A, Vacondio F, **Lodola A**, Bassi M, Silva C, Mor M, Cavalli A. Predicting the Reactivity of Nitrile-Carrying Compounds with Cysteine: A Combined Computational and Experimental Study. *ACS Med Chem Lett.* **2014**, doi: 10.1021/ml400489b
66. Tognolini M, Incerti M, Pala D, Russo S, Castelli R, Hassan-Mohamed I, Giorgio C, **Lodola A**. Target Hopping as a Useful Tool for the Identification of Novel EphA2 Protein-Protein Antagonists. *ChemMedChem.* **2014**, 9, 67-72. doi: 10.1002/cmdc.201300305.

#### ANNO - 2013

67. Tognolini M, Hassan-Mohamed I, Giorgio C, Zanotti I, **Lodola A**. Therapeutic perspectives of Eph-ephrin system modulation. *Drug Discov Today.* **2013** Nov 26. pii: S1359-6446(13)00411-X. doi: 10.1016/j.drudis.2013.11.017.
68. Russo S, Incerti M, Tognolini M, Castelli R, Pala D, Hassan-Mohamed I, Giorgio C, De Franco F, Gioiello A, Vicini P, Barocelli E, Rivara S, Mor M, **Lodola A**. Synthesis and structure-activity relationships of amino acid conjugates of cholanic acid as antagonists of the EphA2 receptor. *Molecules.* **2013**, 18, 13043-13060. doi: 10.3390/molecules181013043.
69. Vacondio F, Carmi C, Galvani E, Bassi M, Silva C, **Lodola A**, Rivara S, Cavazzoni A, Alfieri RR, Petronini PG, Mor M. Long-lasting inhibition of EGFR autophosphorylation in A549 tumor cells by intracellular accumulation of non-covalent inhibitors. *Bioorg Med Chem Lett.* **2013**, 23, 5290-5284. doi: 10.1016/j.bmcl.2013.08.008.
70. Chudyk EI, Dyguda-Kazimierowicz E, Langner KM, Sokalski WA, **Lodola A**, Mor M, Sirirak J, Mulholland AJ. Nonempirical energetic analysis of reactivity and covalent inhibition of fatty acid amide hydrolase. *J Phys Chem B.* **2013**, 117, 6656-6666. doi: 10.1021/jp401834v
71. Pala D, **Lodola A**, Bedini A, Spadoni G, Rivara S. Homology models of melatonin receptors: challenges and recent advances. *Int J Mol Sci.* **2013**, 14, 8093-8121. doi: 10.3390/ijms14048093.
72. Pala D, Beuming T, Sherman W, **Lodola A**, Rivara S, Mor M. Structure-based virtual screening of MT2 melatonin receptor: influence of template choice and structural refinement. *J Chem Inf Model.* **2013**, 53, 821-835. doi:10.1021/ci4000147.
73. Incerti M, Tognolini M, Russo S, Pala D, Giorgio C, Hassan-Mohamed I, Noberini R, Pasquale EB, Vicini P, Piersanti S, Rivara S, Barocelli E, Mor M, **Lodola A**. Amino acid conjugates of lithocholic acid as antagonists of the EphA2 receptor. *J Med Chem.* **2013**, 56, 2936-2947. doi: 10.1021/jm301890k.
74. Christov CZ, **Lodola A**, Karabancheva-Christova TG, Wan S, Coveney PV, Mulholland AJ. Conformational effects on the pro-S hydrogen abstraction reaction in cyclooxygenase-1: an integrated QM/MM and MD study. *Biophys J.* **2013**, 104, L5-7. doi: 10.1016/j.bpj.2013.01.040.
75. **Lodola A**, Capoferri L, Rivara S, Tarzia G, Piomelli D, Mulholland A, Mor M. Quantum mechanics/molecular mechanics modeling of fatty acid amide hydrolase reactivation distinguishes substrate from irreversible covalent inhibitors. *J. Med. Chem.* **2013**, 56, 2500-2512. doi: 10.1021/jm301867x.

#### ANNO - 2012

76. Duranti A, Tontini A, Antonietti F, Vacondio F, Fioni A, Silva C, **Lodola A**, Rivara S, Solorzano C, Piomelli D, Tarzia G, Mor M. "N-(2-Oxo-3-oxetanyl)carbamic Acid Esters as N-Acylethanolamine Acid Amidase Inhibitors: Synthesis, Structure-Activity and Structure-Property Relationships." *J Med Chem.* **2012**, 55, 4824-4836. doi: 10.1021/jm300349j.
77. Rivara S, Pala D, **Lodola A**, Mor M, Lucini V, Dugnani S, Scaglione F, Bedini A, Lucarini S, Tarzia G, Spadoni G. MT1-Selective Melatonin Receptor Ligands: Synthesis, Pharmacological Evaluation, and Molecular Dynamics Investigation of N-[(3-O-Substituted)anilino] alkyl]amides. *ChemMedChem*, **2012**, 7, 1954-1964, doi: 10.1002/cmdc.201200303
78. Tognolini M, Incerti M, Hassan-Mohamed I, Giorgio C, Russo S, Bruni R, Lelli B, Bracci L, Noberini R, Pasquale EB, Barocelli E, Vicini P, Mor M, **Lodola A**. Structure-Activity Relationships and Mechanism of Action of Eph-ephrin Antagonists: Interaction of Cholanic Acid with the EphA2 Receptor. *ChemMedChem*, **2012**, 7, 1071-1083, doi: 10.1002/cmdc.201200102
79. Carmi C, Galvani E, Vacondio F, Rivara S, **Lodola A**, Russo S, Aiello S, Bordi F, Costantino G, Cavazzoni A, Alfieri RR, Ardizzoni A, Petronini PG, Mor M. "Irreversible Inhibition of Epidermal Growth Factor Receptor Activity by 3-Aminopropanamides". *J Med Chem.* **2012**, 55, 2251-2264. doi: 10.1021/jm201507x.
80. **Lodola A**, Branduardi D, De Vivo M, Capoferri L, Mor M, Piomelli D, Cavalli A. "A catalytic mechanism for cysteine N-terminal nucleophile hydrolases, as revealed by free energy simulations". *PLoS One* **2012**, 7, e32397.
81. Fu J, Bottegoni G, Sasso O, Bertorelli R, Rocchia W, Masetti M, Guijarro A, **Lodola A**, Armirotti A, Garau G, Bandiera T, Reggiani A, Mor M, Cavalli A, Piomelli D. "A catalytically silent FAAH-1 variant drives anandamide transport in neurons." *Nat Neurosci.* **2012**, 15, 64-69.

82. Bordi F, Rivara S, Dallaturca E, Carmi C, Pala D, **Lodola A**, Vacondio F, Flammini L, Bertoni S, Ballabeni V, Barocelli E, Mor M. "Dibasic biphenyl H3 receptor antagonists: Steric tolerance for a lipophilic side chain". *Eur J Med Chem*. **2012**, 48, 214-230.

#### ANNO - 2011

83. Palermo G, Branduardi D, Masetti M, **Lodola A**, Mor M, Piomelli D, Cavalli A, De Vivo M. "Covalent inhibitors of fatty acid amide hydrolase (FAAH): A rationale for the activity of piperidine and piperazine aryl ureas." *J Med Chem* **2011**, 54, 6612-6623.
84. Carmi C, **Lodola A**, Rivara S, Vacondio F, Cavazzoni A, Alfieri RR, Ardizzoni A, Petronini PG, Mor M. "Epidermal Growth Factor Receptor Irreversible Inhibitors: Chemical Exploration of the Cysteine-Trap Portion". *Mini Rev Med Chem* **2011**, 11, 1019-1030.
85. Curti C, Battistini L, Sartori A, **Lodola A**, Mor M, Rassu G, Pelosi G, Zanardi F, Casiraghi G. "Catalytic, Asymmetric Bisvinyllogous and Hypervinyllogous Mukaiyama Aldol Reactions of Extended Furan-Based Silyl Enolates." *Org Lett* **2011**, 13, 4738-4741.
86. Vacondio F, Silva C, **Lodola A**, Carmi C, Rivara S, Duranti A, Tontini A, Sanchini S, Clapper JR, Piomelli D, Tarzia G, Mor M. "Biphenyl-3-yl alkylcarbamates as fatty acid amide hydrolase (FAAH) inhibitors: Steric effects of N-alkyl chain on rat plasma and liver stability." *Eur J Med Chem* **2011**, 46, 4466-4473.
87. Giorgio C, Mohamed IH, Flammini L, Barocelli E, Incerti M, **Lodola A**, Tognolini M. "Lithocholic acid is an Eph-ephrin ligand interfering with Eph kinase activation". *Plos One* **2011**, 6, :e18128.
88. **Lodola A**, Capoferri L, Rivara S, Chudyk E, Sirirak J, Dyguda-Kazimierowicz E, Andrzej Sokalski W, Mileni M, Tarzia G, Piomelli D, Mor M, Mulholland AJ. "Understanding the role of carbamate reactivity in fatty acid amide hydrolase inhibition by QM/MM mechanistic modelling." *Chem. Commun* **2011**, 47, 2517-2519.
89. Capoferri L, Mor M, Sirirak J, Chudyk E, Mulholland AJ, **Lodola A**. "Application of a SCC-DFTB QM/MM approach to the investigation of the catalytic mechanism of fatty acid amide hydrolase." *J Mol Model* **2011**, 17, 2375-2383.

#### ANNO - 2010

90. **Lodola A**, Sirirak J, Fey N, Rivara S, Mor, Mulholland AJ. "Structural Fluctuations in Enzyme-Catalyzed Reactions: Determinants of Reactivity in Fatty Acid Amide Hydrolase from Multivariate Statistical Analysis of Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Paths." *J. Chem Theor Comput* **2010**, 6, 2948-2960.
91. Solorzano C, Antonietti F, Duranti A, Tontini A, Rivara S, **Lodola A**, Vacondio F, Tarzia G, Piomelli D, Mor M. "Synthesis and structure-activity relationships of N-(2-oxo-3-oxetanyl)amides as N-acylethanolamine-hydrolyzing acid amidase inhibitors". *J Med Chem* **2010**, 53, 5770-5781.
92. Carmi C, Cavazzoni A, Vezzosi S, Bordi F, Vacondio F, Silva C, Rivara S, **Lodola A**, Alfieri RR, La Monica S, Galetti M, Ardizzoni A, Petroniani PG, Mor M. "Novel Irreversible Epidermal Growth Factor Receptor Inhibitors by Chemical Modulation of the Cysteine-Trap Portion". *J Med Chem* **2010**, 53, 2038-2050.

#### ANNO - 2009

93. Solorzano C, Zhu C, Battista N, Astarita G, **Lodola A**, Rivara S, Mor M, Russo R, Maccarrone M, Antonietti F, Duranti A, Tontini A, Cuzzocrea S, Tarzia G, Piomelli D "Selective N-acylethanolamine-hydrolyzing acid amidase inhibition reveals a key role for endogenous palmitoylethanolamide in inflammation". *Proc Natl Acad Sci USA* **2009** 106, 20966-20971.
94. King AR, Dotsey EY, **Lodola A**, Jung KM, Ghomian A, Qiu Y, Fu J, Mor M, Piomelli D. "Discovery of potent and reversible monoacylglycerol lipase inhibitors." *Chem Biol* **2009**, 16, 1045-1052.
95. Vacondio F, Silva C, **Lodola A**, Fioni A, Rivara S, Duranti A, Tontini A, Sanchini S, Clapper J, Piomelli D, Mor M, Tarzia G. "Structure-Property Relationships of a Class of Carbamate-Based Fatty Acid Amide Hydrolase (FAAH) Inhibitors: Chemical and Biological Stability." *ChemMedChem* **2009**, 4, 1495-1504.
96. King AR, **Lodola A**, Carmi C, Fu J, Mor M, Piomelli D. "A critical cysteine residue in monoacylglycerol lipase is targeted by a new class of isothiazolinone-based enzyme inhibitors." *Br J Pharmacol* **2009**, 157, 974-983
97. Zuliani V, Carmi C, Rivara M, Fantini M, **Lodola A**, Vacondio F, Bordi F, Plazzi PV, Cavazzoni A, Galetti M, Alfieri RR, Petronini PG, Mor M. "5-Benzylidene-hydantoin: Synthesis and antiproliferative activity on A549 lung cancer cell line." *Eur J Med Chem* **2009**, 44, 3471-3479
98. **Lodola A**, Mor M, Sirirak J, Mulholland AJ. "Insights into the mechanism and inhibition of fatty acid amide hydrolase from quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) modeling". *Biochem Soc Trans* **2009**, 37,363-367.

#### ANNO - 2008

99. Mor M, **Lodola A**, Rivara S, Vacondio F, Duranti A, Tontini A, Sanchini S, Piersanti G, Clapper J, King A, Tarzia G, Piomelli D. "Synthesis and QSAR of Fatty Acid Amide Hydrolase Inhibitors: Modulation at the N-Portion of Biphenyl-3-yl Alkylcarbamates". *J Med Chem*, **2008**, 51,3487-3498.
100. Christov CZ, Karabencheva TG, **Lodola A**. "Relationship between chiroptical properties, structural changes and interactions in enzymes: a computational study on  $\beta$ -lactamases from class A". *Comput Biol Chem* **2008**, 32, 167-175.
101. Cavazzoni A, Alfieri RR, Carmi C, Zuliani V, Galetti M, Fumarola C, Frazzi R, Bonelli M, Bordi F, **Lodola A**, Mor M, Petronini PG. "Dual mechanisms of action of the 5-benzylidene-hydantoin UPR1024 on lung cancer cell lines". *Mol Cancer Ther* **2008**, 7, 361-370.
102. Christov C, Karabencheva T, **Lodola A**. "Aromatic interactions and rotational strengths within protein environment: An electronic structural study on beta-lactamases from class A". *Chem Phys Lett* **2008**, 456, 89-95.
103. **Lodola A**, Mor M, Rivara S, Christov C, Tarzia G, Piomelli D, Mulholland AJ. "Identification of productive inhibitor binding orientation in fatty acid amide hydrolase (FAAH) by QM/MM mechanistic modelling". *Chem Commun* **2008**, 2, 214-216.

#### ANNO - 2007

104. Rivara S, **Lodola A**, Mor M, Bedini A, Spadoni G, Tarzia G, Lucini V, Pannacci M, Fraschini F, Scaglione F, Gobbi G, Sanchez RO. "N-(Substituted-anilinoethyl)acylamines: Design, Synthesis and Pharmacological Characterization of a New Class of Melatonin Receptor Ligands" *J Med Chem* **2007**, 50, 6618-6626.
105. Valitutti G, Duranti A, **Lodola A**, Mor M, Piersanti G, Piomelli D, Rivara S, Tontini A, Tarzia G, Traldi P. "Correlation between energetics of collisionally activated decompositions, interaction energy and biological potency of carbamates FAAH inhibitors". *J Mass Spec* **2007**, 42, 1624-1627.
106. Spadoni G, Bedini A, Diamantini G, Tarzia G, Rivara S, Lorenzi S, **Lodola A**, Mor M, Lucini V, Pannacci M, Caronno A, Fraschini F. "Synthesis, Enantiomeric Resolution, and Structure-Activity Relationship Study of a Series of 10,11-Dihydro-5H-Dibenzo[a,d]cycloheptene MT(2) Receptor Antagonists". *ChemMedChem* **2007**, 2, 1741-1749.
107. **Lodola A**, Mor M, Zurek J, Tarzia G, Piomelli D, Harvey JN, Mulholland AJ. "Conformational effects in enzyme catalysis: reaction via a high energy conformation in fatty acid amide hydrolase". *Biophys J* **2007**, 92, L20-L22.

#### ANNO - 2006

108. Bedini A, Spadoni G, Gatti G, Lucarini S, Tarzia G, Rivara S, Lorenzi S, **Lodola A**, Mor M, Lucini V, Pannacci M, Scaglione F. "Design and Synthesis of N-(3,3 Diphenylpropenyl) alkanamides as a Novel Class of High-Affinity MT(2)-Selective Melatonin Receptor Ligands". *J Med Chem* **2006**, 49, 7393-7403.
109. Tarzia G, Duranti A, Gatti G, Piersanti G, Tontini A, Rivara S, **Lodola A**, Plazzi PV, Mor M, Kathuria S, Piomelli D. "Synthesis and structure-activity relationships of FAAH inhibitors: cyclohexylcarbamic acid biphenyl esters with chemical modulation at the proximal phenyl ring". *ChemMedChem*. **2006**, 1,130-139.
110. Carmi C, Cavazzoni A, Zuliani V, **Lodola A**, Bordi F, Plazzi PV, Alfieri RR, Petronini PG, Mor M. "5-benzylidene-hydantoins as new EGFR inhibitors with antiproliferative activity". *Bioorg Med Chem Lett* **2006**, 16, 4021-4025.
111. Rivara S, Mor M, Lorenzi S, **Lodola A**, Plazzi PV, Spadoni G, Bedini A, Tarzia G. "MT2 Selective melatonin receptor antagonists: design and structure-activity relationships". *Arkivoc* **2006**, 8, 8-16.

#### ANNO - 2005

112. **Lodola A**, Mor M, Hermann JC, Tarzia G, Piomelli D, Mulholland AJ. "QM/MM modelling of oleamide hydrolysis in fatty acid amide hydrolase (FAAH) reveals a new mechanism of nucleophile activation". *Chem Commun* **2005**, 35, 4399-401.
113. Mor M, Rivara S, **Lodola A**, Lorenzi S, Bordi F, Plazzi PV, Spadoni G, Bedini A, Duranti A, Tontini A, Tarzia G. "Application of 3D-QSAR in the rational design of receptor ligands and enzyme inhibitors". *Chemistry & Biodiversity* **2005**, 2, 1438-51.

#### ANNO - 2004

114. Mor M, Rivara S, **Lodola A**, Plazzi PV, Tarzia G, Duranti A, Tontini A, Piersanti G, Kathuria S, Piomelli D. "Cyclohexylcarbamic acid 3'- or 4'-substituted biphenyl-3-yl esters as fatty acid amide hydrolase inhibitors: synthesis, quantitative structure-activity relationships, and molecular modeling studies." *J Med Chem* **2004**, 47, 4998-5008.

115. Amari G, Armani E, Ghirardi S, Delcanale M, Civelli M, Caruso PL, Galbiati E, Lipreri M, Rivara S, **Lodola A**, Mor M. "Synthesis, pharmacological evaluation, and structure activity relationships of benzopyran derivatives with potent SERM activity". *Bioorg Med Chem* **2004**, 12, 3763-82.
116. Kellogg GE, Fornabaio M, Spyraakis F, **Lodola A**, Cozzini P, Mozzarelli A, Abraham DJ. "Getting it right: modeling of pH, solvent and "nearly" everything else in virtual screening of biological targets". *J Mol Graph Model*. **2004**, 22, 479-86.

- **Capitoli di libro**

1. **Lodola A**, Callegari D, Scalvini L, Rivara S, Mor M. Design and SAR Analysis of Covalent Inhibitors Driven by Hybrid QM/MM Simulations. In *Methods Mol Biol*. **2020**; 2114:307-337. doi: 10.1007/978-1-0716-0282-9\_19.
2. **Lodola A**, Rivara S, Mor M. "Insights in the mechanism of action and inhibition of N-acyl ethanolamine acid amidase by means of computational methods". *Adv Protein Chem Struct Biol*. In Christo Christov (ed) **Advances in Protein Chemistry and Struct Biology**, Volume 96. Amsterdam: Elsevier, 2014 p. 219.
3. **Lodola A**, Mulholland AJ. "Computational enzymology". In *Methods Mol Biol*. **2013**, 924, 67-89. doi: 10.1007/978-1-62703-017-5\_4.
4. **Lodola A**, Mor M. "Fatty Acid Amide Hydrolase – Computational Studies". In G.C.K. Roberts (ed.), **Encyclopedia of Biophysics**, 2013, doi:10.1007/978-3-642-16712-6 (book chapter).
5. **Lodola A**, De Vivo M. "The increasing role of QM/MM in drug discovery". In Christo Christov (ed) **Advances in Protein Chemistry and Struct Biology**, Volume 87. Amsterdam: Elsevier, 2012 p. 337.
6. **Lodola A**, Rivara S, Mor M. "Application of Computational Methods to the Design of Fatty Acid Amide Hydrolase (FAAH) Inhibitors based on a Carbamic Template Structure". In Christo Christov (ed) **Advances in Protein Chemistry and Struct Biology**, Volume 85. Amsterdam: Elsevier, 2011 p. 337 p 1.
7. Mor M, **Lodola A**. "Pharmacological Tools in Endocannabinoid Neurobiology" In D. Kendall and S. Alexander (eds.), **Behavioral Neurobiology of the Endocannabinoid System**, Springer-Verlag Berlin Heidelberg **2009**, p 88.
8. **Lodola A**, Woods C, Mulholland AJ. "Applications and Advances of QM/MM Methods in Computational Enzymology". In RA Wheeler and DC Spellmeyer, (eds) **Annual Reports in Computational Chemistry**, Volume 4. Amsterdam: Elsevier, **2008**, p. 155

Parma, 15/10/2024

Alessio Lodola