



Curriculum Vitae Prof. Giulio Rastelli

Molecular Modelling & Drug Design Laboratory
Dipartimento di Scienze della Vita, Università di Modena e Reggio Emilia,
Italy.

Data e luogo di nascita: 28/9/1965, Modena
Affiliazione: Dipartimento di Scienze della Vita
Università di Modena e Reggio Emilia
Via Campi, 103 - 41125 Modena, ITALY.
Phone: +39-059-2058564
e-mail: giulio.rastelli@unimore.it
Web Page: www.mmddlab.unimore.it

1. Formazione e titoli di studio

- 1985-1990 Corso di Laurea in Chimica, Università di Modena e Reggio Emilia. Laureato in Chimica *con lode*, discutendo una tesi dal titolo "Molecular modelling e design di molecole mediante computer. Studio di antagonisti del recettore α -1 e di inibitori dell'anidraasi carbonica"
- 1991-1993 Dottorato di ricerca in Scienze del Farmaco, Università di Modena e Reggio Emilia, dal titolo "Molecular modelling e analisi QSAR di derivati flavonici implicati in processi biologici di tipo ox/redox"
- 1994-1995 Postdoc in Chimica Farmaceutica, Università di Modena e Reggio Emilia

2. Posizioni ed esperienze di ricerca:

- 2021-presente Professore Ordinario in Chimica Farmaceutica (SSD CHIM/08), Università di Modena e Reggio Emilia.
- 2005-2021 Professore Associato in Chimica Farmaceutica (SSD CHIM/08), Università di Modena e Reggio Emilia.
- 1996-2005 Ricercatore in Chimica Farmaceutica (SSD CHIM/08) presso la Facoltà di Farmacia dell'Università di Modena e Reggio Emilia.
- 1999-presente Responsabile scientifico del laboratorio MMDDLab (Molecular Modelling & Drug Design Lab, www.mmddlab.unimore.it), Università di Modena e Reggio Emilia.
- 1995 Borsa di studio di Post-dottorato in Chimica Farmaceutica, Università di Modena e Reggio Emilia.
- 1994 Borsa di studio ERSO per la ricerca scientifica, Università di Modena e Reggio Emilia.
- 1993 Visiting scientist al Department of Pharmaceutical Chemistry, and Biochemistry and Biophysics, University of California San Francisco, USA. Referenti: Proff. Daniel Santi e Peter Kollman.
- 1990 Contratto di consulenza con Farmitalia-Carlo Erba.
- 1985-1988 Impiego presso il laboratorio di analisi chimiche di Stholl Farmaceutici s.p.a., Modena.

3. Incarichi e Servizi:

- 2020-presente: nomina ad esperto scientifico a supporto dell'Italian National Contact Point

- per la definizione delle priorità del cluster HEALTH proposte alla Commissione Europea.
- 2020: nomina a membro della Commissione Giudicatrice del concorso pubblico per titoli ed esami per la copertura di un posto di categoria D, posizione economica D1, area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati, per il dipartimento di Scienze della Vita dell'Università di Modena e Reggio Emilia.
 - 2016-presente: Presidente della Commissione Monitoraggio Carriere per il corso di laurea in CTF, Università di Modena e Reggio Emilia.
 - 2016-presente: Rappresentante dell'area Farmacia nella Giunta del Dipartimento di Scienze della Vita, Università di Modena e Reggio Emilia.
 - 2009-2010: membro del Comitato di Ateneo per il reclutamento dei ricercatori a tempo determinato, in qualità di rappresentante dell'area 03 Scienze Chimiche.
 - Rappresentante del Dipartimento nel Laboratorio di Calcolo Scientifico Avanzato Interdipartimentale (LabCsai) dell'Università di Modena e Reggio Emilia.
 - Membro della Commissione di Riesame della Facoltà di Bioscienze e Biotecnologie, Università di Modena e Reggio Emilia.
 - Membro della Commissione Didattica della Facoltà di Bioscienze e Biotecnologie, Università di Modena e Reggio Emilia.
 - Docente di riferimento e tutor per il CdL magistrale in Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche (LM9) della Facoltà di Bioscienze e Biotecnologie, Università di Modena e Reggio Emilia. AA 2009-2010, 2010-2011, 2011-2012.
 - Presidente della Commissione per l'ammissione al corso di laurea magistrale in Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche della Facoltà di Bioscienze e Biotecnologie, AA 2010-2011, AA 2011-2012, AA 2012-2013.
 - Rappresentante dei ricercatori nel Consiglio di Facoltà di Farmacia per gli AA. 2001/02, 2002/03 e 2003/04
 - Responsabile della Commissione Informatica del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università di Modena e Reggio Emilia.

4. Partecipazione a comitati editoriali e società:

- Membro ad invito nella prestigiosa Faculty of 1000 (F1000) per la sezione "Drug Discovery & Design", Ott 2016-presente.
- Membro dell'Editorial Board della rivista *Molecules* (ISSN 1420-3049), Mag 2019-presente
- Membro dell'Editorial Advisory Board della rivista *Current Medicinal Chemistry* (ISSN 1875-533), Dic 2016-presente
- Membro dell'Editorial Board della rivista *International Journal of Medicinal Chemistry* (ISSN 2090-2069) (Ott 2009- Mag 2015).
- Membro dell'Editorial Board della rivista *Computational Molecular Bioscience* (ISSN 2165-3445) (Mag 2013-presente).
- Membro dell'International Advisory Board della rivista *Annals of Tropical Medicine and Public Health* (ISSN:1755-6783), Mar 2011-presente.
- Membro dell'Editorial Board della rivista *Science Asia* (ISSN 1513-1874), rivista della Science Society of Thailand (www.scienceasia.org). (Mar 2008-presente).
- Membro della Società Chimica Italiana (SCI), Divisione di Chimica Farmaceutica.
- Socio dell'Associazione Italiana per la Ricerca sul Cancro (AIRC) (2009-presente).
- Membro della QSAR, Chemoinformatics & Modeling Society (QCMS, www.qsar.org) (Ott 2017-presente)

5. Riconoscimenti e Premi:

- Bioorganic & Medicinal Chemistry Most Cited Paper 2003-2006 Award per la pubblicazione “Synthesis and biological activities of novel 17-aminogeldanamycin derivatives”, *Bioorg. Med. Chem.* 2004, 12, 5317.
- Top 25 Hottest Article 2007, per la pubblicazione “Virtual screening on large scale grids”, *Parallel computing* 2007, 33, 289. Rank position #17/25.
- Top 25 Hottest Article 2006, per la pubblicazione “Structure-based design of 7-carbamate analogs of geldanamycin”. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2005, 15, 5016-5021. Rank position #13/25.
- Top 25 Hottest Article 2004, per la pubblicazione “Synthesis and biological activities of novel 17-aminogeldanamycin derivatives”, *Bioorg. Med. Chem.* 2004, 12, 5317-5329. Rank position #6/25.
- Journal of Computational Chemistry Most Cited Paper 2010-2011 per la pubblicazione “Fast and accurate predictions of relative binding free energies using MM-PBSA and MM-GBSA” *J. Comp. Chem.* 2010, 31, 797-810.
- Classificazione “Highly accessed” (Feb 2012) per la pubblicazione “WISDOM-II: Screening against multiple targets implicated in malaria using computational grid infrastructures”, *Malaria Journal* 2009, 8, 88
- Invitation to contribute to a Special Issue of *Future Medicinal Chemistry* entitled “Computational chemistry & computer-aided drug discovery” with the article “Exploiting computationally derived out-of-the-box protein conformations for drug design”. by Caporuscio and Rastelli, *Future Med. Chem.* 2016, 8, 1887-1897.
- Selection of the article “ α C helix displacement as a general approach for protein kinases allosteric modulation” (Drug Discovery Today 2013, 18, 407-414) in the special issue “The View from Here” of Drug Discovery Today (21 Oct 2014, <http://www.drugdiscoverytoday.com/view/40406/the-current-issue-of-the-view-from-here-discusses-allosterism-in-drug-discovery/>)
- Ringraziamento da parte dell’Editore della rivista Drug Discovery Today, Dr Steve Carney, per il contributo dato alla rivista con la pubblicazione “ α C helix displacement as a general approach for protein kinases allosteric modulation”. Drug Discov. Today 2013, 18, 407-414.
- Tre F1000Prime recommendations per l’articolo “Polypharmacology: Challenges and Opportunities in Drug Discovery”, *J. Med. Chem.*, 2014, 57, 7874-7887 in quanto di particolare rilevanza e interesse nel campo di “Pharmacology & Drug Discovery”. I DOI delle tre recensioni sono disponibili in: 10.3410/f.718457187.793496592, 10.3410/f.718457187.793498100, e 10.3410/f.718457187.793499208.
- Premio per migliore comunicazione orale assegnato al Dott Luca Pinzi per la comunicazione “Predicting drug polypharmacology using structural databases”. XVI Giornata della Chimica dell’Emilia Romagna, Ferrara 19 Dicembre 2016. Comunicazione orale O3, pag 16.
- Premio ex-aequo per la migliore comunicazione orale, XII Giornata di Chimica dell’Emilia-Romagna, Ferrara 17 Dicembre 2012. Comunicazione FC7 Andrew Anighoro, Dagmar Stumpfe, Jürgen Bajorath, Giulio Rastelli. “Targeting the Hsp90 interactome using in silico polypharmacology approaches”.
- Docente di riferimento nella Scuola di Dottorato “Clinical and Experimental Medicine (CEM) - Medicina Clinica e Sperimentale, Università di Modena e Reggio Emilia, 2013-presente.
- Premiazione per l’aggiudicazione di un finanziamento di 23.000 euro da parte della Banca Popolare dell’Emilia Romagna (BPER) in occasione della Serata degli Auguri 2014 di BPER, che ha avuto luogo al Forum Monzani, Modena, il 17 Dicembre 2014. Articoli su La Gazzetta di Modena del 19 Dicembre 2014 e il Resto del Carlino del 19 Dicembre 2014.

- Articoli sulla Gazzetta di Modena del 30/12/2013 e sul Resto del Carlino del 2/1/2014 riportante la notizia che il gruppo del Prof Rastelli è capofila di un progetto di ricerca sul cancro finanziato dalla Fondazione Nando Peretti.
- Articolo su Modena Today del 4/5/2015 riportante la notizia che il gruppo del Prof Rastelli è capofila di un progetto di ricerca su farmaci antitumorali finanziato da AIRC.
- Comunicato stampa del 4/3/2015 riportante la notizia che il Prof Rastelli coordina una ricerca sullo sviluppo di molecole allosteriche per farmaci efficaci contro i tumori: sostegno da AIRC e Banca Popolare dell'Emilia Romagna
- Most cited article published since 2017 in the journal "*Drug Discovery Today*": "The 1,2,3-triazole ring as a bioisostere in medicinal chemistry", *Drug Discov. Today* 2017, 22, 1572-1581.
- Inclusione dell'articolo "2-Phenyloxazole-4-carboxamide as new scaffold for selective inhibition of human monoamine oxidase B" (*ChemMedChem* 2019, 14, 1641-1652) nella Hot Topic Special Collection on Neuromedicine di Apr 2020, disponibile a bit.ly/cmc-2020-neuro.
- Premio di studio Fondazione Cassa di Risparmio di Carpi per la miglior tesi di laurea discussa presso l'Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia - Anno solare 2019 – Area medica-biologica assegnato alla Dott.ssa Anna Laura Benatti per la tesi in CTF dal titolo "Identificazione di un inibitore potente dell'anidraasi carbonica attraverso una campagna di riposizionamento computazionale", AA 2018/19, Relatore Prof. Giulio Rastelli.
- Premio di laurea "Premio Neutron alla memoria del dott. Gian Carlo Gatti" 1^a classificata Dott.ssa Anna Laura Benatti per la tesi in CTF dal titolo "Identificazione di un inibitore potente dell'anidraasi carbonica attraverso una campagna di riposizionamento computazionale", AA 2018/19, Relatore Prof. Giulio Rastelli.
- Articolo su Gazzetta di Modena, Modena 2000, e comunicato stampa su UNIMORE Magazine riportante la notizia che la Dott.ssa Anna Laura Benatti ha vinto il premio di laurea "Premio Neutron alla memoria del dott. Gian Carlo Gatti" 1^a classificata, 9 Gennaio 2021.
- Articolo sulla Gazzetta di Modena del 25/1/2020 riportante la notizia che il gruppo del Prof Rastelli è capofila di un nuovo progetto di ricerca sul cancro finanziato da AIRC.

6. **Indici bibliometrici:**

ResearcherID: D-2224-2015
 ORCID ID: 0000-0002-2474-0607
 Scopus Author ID: 7004398858

Indici bibliometrici (16 Settembre 2021): 124 pubblicazioni, H-index=34, #citazioni totali=4636, (fonte dati Scopus).

7. **Brevetti:**

- Doman Kim, Hee Kyoung Kang, Do Won Kim, Giulio Rastelli, Ana-Lucia Da Costa, Vinod Kasam, Vincent Breton. "*Pharmaceutical composition for preventing and treating malaria containing compounds that inhibit Plasmeprin II activity, and method of treating malaria using the same*". WO2009131384 A2, PCT application PCT/KR2009/002114.

8. **Strutture cristallografiche depositate nel PDB:**

Il prof. Rastelli è co-autore delle seguenti strutture cristallografiche depositate nel Protein Data Bank:

- 1OSF: “Human Hsp90 in complex with 17-desmethoxy-17-N,N-Dimethylaminoethylamino-Geldanamycin” (2003)
- 3C9W: “Crystal Structure of ERK-2 with hypothemycin covalently bound” (2008)

9. *Finanziamenti per la ricerca scientifica:*

- Progetto di Ricerca Orientata, Università di Modena e Reggio Emilia, Agosto 1998-Settembre 2000, dal titolo “Enzima diidrofolato reductasi del genere *Plasmodium falciparum* e suoi mutanti resistenti ai farmaci antimalarici classici. Molecular modelling della struttura tridimensionale dell’enzima nativo e dei mutanti resistenti e progettazione di inibitori attivi sulle forme resistenti”. *Ruolo: Coordinatore della ricerca.*
- Contratto di ricerca tra il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell’Università di Modena e Reggio Emilia e Kosan Biosciences per l’esecuzione di una ricerca sul tema “Molecular modelling e progettazione di polichetidi farmacologicamente attivi”, Nov 2000-Nov 2001, *Ruolo: Coordinatore della ricerca.*
- Contratto di ricerca tra il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell’Università di Modena e Reggio Emilia e Kosan Biosciences per l’esecuzione di una ricerca sul tema “Molecular modelling e progettazione di polichetidi farmacologicamente attivi”, Nov 2001-Feb 2002, *Ruolo: Coordinatore della ricerca.*
- Convenzione con il Dipartimento di Biochimica della Mahidol University (Bangkok, Thailandia) per il co-finanziamento di un assegno di ricerca sul tema “Progettazione e sviluppo di inibitori della Diidrofolato reductasi del genere *Plasmodium falciparum* quali nuovi lead antimalarici”, Marzo 2001. *Ruolo: Responsabile della ricerca.*
- Contratto di ricerca con Kosan Biosciences per l’istituzione di una borsa di studio sul tema “Molecular modelling e progettazione di polichetidi farmacologicamente attivi”, anno 2001. *Ruolo: Coordinatore della ricerca.*
- FP5 INCO-DEV ICA4-CT-2001-10077 2001-2004 Progetto “PVPFDHFR” dal titolo “Dihydrofolate reductase-thymidylate synthase from Plasmodium vivax and P. falciparum as targets for antimalarial chemotherapy”. *Ruolo: Principal Contractor.*
- FISR (Fondo Integrativo Speciale per la Ricerca del MIUR)1504 Ric, 2002-2004 “Molecular modeling and design of pharmaceutically active polyketides”. *Ruolo: Coordinatore della ricerca.*
- AIRC (Associazione Italiana per la Ricerca sul Cancro) Investigator Grant IG5049, triennio 2008-2010 “Novel irreversible protein kinase inhibitors targeting a conserved active site cysteine”. *Ruolo: Coordinatore del progetto.*
- Spinner 2013 (Regione Emilia Romagna), Idee imprenditoriali innovative e/o ad alto contenuto di conoscenza. Progetto “BEAR” (Binding Estimation After Refinement), Prot. N 196/09, 2009-2010. *Ruolo: Coordinatore del progetto.*
- Contratti PaP con Recordati SpA (Milano).
- Spinner 2013 (Regione Emilia Romagna), Percorsi di mobilità e collaborazione internazionale. Progetto “DynPharmaGel”, Prot. N 099/12, 2012-2013. *Ruolo: Coordinatore del progetto.*
- Fondazione Nando Peretti. “Research study on anticancer drugs targeting the CDK2 and EGFR proteins” Prot. NPF 2013-25, Sept 2013-Sept 2015. *Ruolo: Coordinatore del progetto.*
- AIRC (Associazione Italiana per la Ricerca sul Cancro) Investigator Grant IG 2014 Id. 15993, Jan 2015-Jan 2018 “Design and development of CDK2 and EGFR type III allosteric inhibitors as anticancer drugs”. *Ruolo: Coordinatore del progetto.*
- Banca Popolare dell’Emilia Romagna, donazione per istituire un assegno di ricerca su progetto di ricerca su farmaci antitumorali, 2015.

- H2020-MSCA-ITN-EID European Industrial Doctorates (2016-2019) Progetto BIGCHEM (Big Data in Chemistry), Project Id. 676434. Role: PI of partner organization.
- Progetti di formazione alla ricerca 2018-2021 ambito B “Risorse umane per la specializzazione intelligente” dal titolo “Tecnologie data driven per il riposizionamento dei farmaci”. Borsa triennale di dottorato finanziata dalla Regione Emilia Romagna. Role: PI
- Progetto di ricerca su farmaci antitumorali allosterici, LegaCoop 2018.
- Banca Popolare dell’Emilia Romagna, donazione a favore di una ricerca sull’utilizzo dei big data in campo farmaceutico, 2019.
- Fondo di Ateneo per la Ricerca (FAR 2019, DR496/2019) per il finanziamento di progetti di ricerca interdisciplinari, Linea UNIMORE. Progetto “LigAdvisor: a web server for drug design based on big data”. 1 Ago 2019 – 31 Gen 2022. *Ruolo: Coordinatore del progetto.*
- Borsa di ricerca “Post-doctoral fellowships 2020 – anno 2020” della Fondazione Umberto Veronesi dal titolo “Design and optimization of dual inhibitors of Hsp90 and HDAC6 for targeting metastatic castrate-resistant prostatic cancer”. Applicant Dr Luca Pinzi, PI Prof Giulio Rastelli.
- Borsa di studio triennale FIRC-AIRC Rif 24096 per l’anno 2020 “Three-Years Fellowship Carlo Zanotti” dal titolo “Design and discovery of allosteric inhibitors of BRAF. Applicant Dr Luca Pinzi, PI Prof Giulio Rastelli.
- AIRC (Associazione Italiana per la Ricerca sul Cancro) Investigator Grant IG 2019 Id. 23635, Jan 2020-Jan 2025 “Targeting metastatic castrate-resistant prostatic cancer with HDAC6/Hsp90 dual inhibitors”. *Ruolo: Coordinatore del progetto.*
- Fondo di Ateneo per la Ricerca (FAR) 2020 per il finanziamento di attrezzature. Finanziamento per l’acquisto di un sistema di calcolo ad alte prestazioni. Giugno 2020. *Ruolo: Co-proponente, Responsabile Prof. Alfonso Pedone.*
- Borsa di studio di Dottorato di ricerca su tematiche specifiche dalla Regione Emilia-Romagna in attuazione del Programma “Big data per una Regione Europea più ecologica, digitale e resiliente - POR FSE 2014/2020 obiettivo tematico 10”, deliberazione N. 454/2021, 2021-2024 dal titolo “Riposizionamento di farmaci attivi contro gli stadi avanzati del tumore alla prostata tramite analisi di big data e tecniche di intelligenza artificiale”. Borsa triennale di dottorato di ricerca finanziata dalla Regione Emilia Romagna. Role: PI

10. Finanziamenti competitivi per progetti di calcolo scientifico

- ISCRA (Italian Super Computing Resource Allocation), Progetto BEAR 2010, Project HP10A6E2CI. Class A project, 500k CPU hours. Progetto presentato su Cineca HPC Reports 2014, BEAR (Binding Estimation After Refinement), a powerful tool for virtual screening of potential drugs.
- ISCRA (Italian Super Computing Resource Allocation), Progetto VSCBX7 (Virtual screening of anticancer ligands targeting CBX7), 2014, Project HP10CRTPO0. Class C project, 800k CPU hours on FERMI.
- ISCRA (Italian Super Computing Resource Allocation), Progetto AntiCBX7, 2015, Project HP10C68GKI. Class C project, 75k CPU hours on GALILEO.

11. Attività di reviewing

Reviewer di domande di finanziamento competitive per:

- Ministero dell’Istruzione, dell’Università e della Ricerca (MIUR), bando PRIN 2012.

- Partecipazione al Comitato di Valutazione Scientifica del French National Cancer Institute (INCa), per la valutazione di domande di finanziamento per progetti di ricerca sul cancro, call “Biology and Basic Sciences for Cancer Research”, per gli anni 2017, 2018 e 2019.
- Swiss National Science Foundation (SNSF), evaluation of Professorship application, 2014
- Israel Science Foundation (ISR), valutazioni di domande di finanziamento per gli anni 2009 e 2010
- Portuguese Foundation for Science and Technology (FCT), valutazione di domande di finanziamento 2009
- Austrian Academy of Sciences (Doctoral Fellowship Programme of the Austrian Academy of Sciences), 2018.
- CINECA, richiesta di valutare progetti di calcolo ISCRA (Italian Super Computing Resource Allocation), 2010
- CINECA, richiesta di valutare progetti di calcolo PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), 2012

Reviewer di tesi di Dottorato e ricercatori RTD-B per:

- Università di Catanzaro, Gen 2019
- Università di Pisa, Feb 2019
- Università di Milano, Nov 2020
- Università di Genova, Nov 2020

Reviewer di manoscritti per le seguenti riviste:

J Med Chem, Eur J Med Chem, ChemMedChem, Bioorg Med Chem, Bioorg Med Chem Lett, Drug Discov Today, MedChemComm, ACS Med Chem Lett, J Am Chem Soc, Future Med Chem, J Chem Inf Model, Biophys Chem, J Comput-Aided Mol Des, J Comput Chem, Chem Biol Drug Des, J Mol Graph Model, Curr Med Chem, Lett Drug Des Discov, Int J Parasitol, ScienceAsia, J Phys Chem, Biology, J Chem Theory Comput, Biochim Biophys Acta, Mol Informatics, Acta Biochimica et Biophysica Sinica, Plos One, Int J Mol Sci, Mol Biosyst, Scientific Reports, Nature Commun, ed altri.

12. Organizzazione di Conferenze, Workshops o Meetings

Il Prof. Rastelli è stato organizzatore o membro del comitato organizzatore di:

- Partecipazione al comitato organizzatore di ITCHMC 2005, Second Joint Italian-Swiss Meeting on Medicinal Chemistry. September 12-16, 2005 – Modena (Italy)
- Partecipazione al comitato organizzatore dell'International workshop on "Medicinal Chemistry in Parasitology", January 23, 2004. Modena (Italy).
- Organizzatore e chairman del 1st Meeting AIRC (Associazione Italiana per la Ricerca sul Cancro) del progetto “Design and development of CDK2 and EGFR type III allosteric inhibitors as anticancer drugs” (AIRC IG 15993), Modena 11 Dicembre 2014.
- Organizzatore e chairman del 2nd Meeting AIRC (Associazione Italiana per la Ricerca sul Cancro) del progetto “Design and development of CDK2 and EGFR type III allosteric inhibitors as anticancer drugs” (AIRC IG 15993), Modena 12 Ottobre 2015.
- Organizzatore e chairman della BIGCHEM second Autumn School: Computer-Aided Drug Discovery. Modena, 25-27 October 2017. Winter School per dottorandi Marie Curie del progetto H2020-MSCA-ITN-EID dal titolo “BIGCHEM” (Big Data in Chemistry). La tematica della scuola è stata “Computer-aided drug discovery”, Modena 25-27 Ottobre 2017 (sito web

della scuola <http://bigchem.eu/node/77>). La scuola è stata aperta al pubblico ed ha visto la partecipazione di 82 ricercatori provenienti da varie parti d'Europa.

- Organizzatore e chairman dell'RNPDD meeting ("Repositioning Natural Products in Drug Discovery"). Modena 17 Gen 2020. L'evento ha visto la partecipazione di 67 ricercatori provenienti da tutta Italia ed operanti in ambiti chimico-farmaceutici, analitici, computazionali, biologici, tutti accomunati dall'interesse verso il "riposizionamento" di prodotti naturali in campo farmaceutico. Il sito web del meeting è disponibile all'indirizzo <http://www.mmddlab.unimore.it/site/home/rnpdd-meeting.html>). Al meeting è associata una special issue sulla rivista *Molecules*, con lo stesso nome del meeting (https://www.mdpi.com/journal/molecules/special_issues/repositioning)
- Membro del Comitato Organizzatore dell'RDPA 2021 (Recent Developments in Pharmaceutical Analysis) e chair della sessione "Cannabis and Cannabinoids Analysis", Modena 5-8 Settembre 2021, Italy.

14. *Responsabilità e direzione dei progetti di ricerca più rilevanti*

Nell'ambito delle attività di ricerca più rilevanti il Prof Rastelli ha rivestito i seguenti ruoli:

- **Responsabilità scientifica del laboratorio MMDDLab (Molecular Modelling & Drug Design Lab) di UNIMORE.**

Il Prof Rastelli è responsabile del Molecular Modelling & Drug Design Lab (MMDDLab) di UNIMORE (<http://www.mmddlab.unimore.it>). Le attività del laboratorio sono principalmente rivolte alla progettazione e sviluppo di molecole biologicamente attive e alla loro ottimizzazione preclinica. Un ruolo fondamentale è rivestito dallo sviluppo ed applicazione di metodologie computazionali innovative per il drug design. Collabora con numerose istituzioni pubbliche e private per lo sviluppo di molecole biologicamente attive, con particolare riferimento a candidati farmaci antitumorali. Il Prof Rastelli coordina o collabora a molteplici progetti di drug discovery, potendo contare su una consolidata rete di collaborazioni nazionali e internazionali (sintesi, biologia, farmacologia, cristallografia, proteomica, farmacocinetica).

- **Partecipazione o direzione delle ricerche condotte nel campo della progettazione e sviluppo di inibitori dell'enzima xantina ossidasi (1992-1997)**

Negli anni 1992-1997 il Prof. Rastelli ha partecipato oppure è stato responsabile delle ricerche condotte nel campo della progettazione e sviluppo di inibitori dell'enzima xantina ossidasi, come evidenziato dalle numerose pubblicazioni scientifiche, molte delle quali a primo nome o autore di corrispondenza.

- **Partecipazione o direzione delle ricerche condotte nel campo della progettazione e sviluppo di inibitori dell'enzima aldose reduttasi (1996-2002)**

Negli anni 1996-2002 il Prof. Rastelli ha partecipato oppure è stato responsabile delle ricerche condotte nel campo della progettazione e sviluppo di inibitori dell'enzima aldoso reduttasi, come evidenziato dalle numerose pubblicazioni scientifiche, molte delle quali a primo nome o autore di corrispondenza. Per queste ricerche il prof Rastelli ha collaborato con gruppi di ricerca sia nazionali sia internazionali, come si evince dalla presenza di co-autori di altri atenei o enti di ricerca italiani o stranieri.

- **Coordinazione italiana del progetto europeo "PVPFDHFR", 5° Programma Quadro INCO-DEV ICA4-CT-2001-10077 2001-2004 "Dihydrofolate reductase-thymidylate synthase from Plasmodium vivax and P. falciparum as targets for antimalarial chemotherapy" (2001-2004)**

Il prof Rastelli è stato responsabile scientifico dell'unità di ricerca UNIMORE all'interno del progetto FP5 INCO-DEV finanziato dalla Comunità Europea dal titolo "Dihydrofolate reductase-thymidylate synthase from *Plasmodium vivax* and *P. falciparum* as targets for antimalarial chemotherapy", acronimo "PVPFDHFR" (FP5 INCO-DEV ICA4-CT-2001-10077).

Il progetto è stato sviluppato da un consorzio di quattro unità appartenenti a quattro paesi: Gran Bretagna (Prof Gordon Lowe, PI), Italia (Prof Giulio Rastelli), Tailandia (Prof Yongyuth Yuthavong), e India (Prof VS Chauhan). Il consorzio ha raggruppato competenze di biochimica, farmacologia, sintesi, cristallografia e molecular modelling per lo studio delle forme farmacoresistenti delle Diidrofolato reductasi dei generi *Plasmodium falciparum* e *Plasmodium vivax* e la progettazione e sviluppo di nuovi inibitori delle DHFR ad attività antimalarica. Tale ricerca era già stata avviata in precedenza grazie ad una stretta collaborazione con il Prof. Worachart Sirawaraporn (Department of Biochemistry, Mahidol University, Tailandia), con cui sono stati attivati anche vari contratti di finanziamento.

Le ricerche sono state oggetto di numerose pubblicazioni su riviste internazionali peer-reviewed, di cui molte a primo nome o autore di corrispondenza. Alcune di queste presentano un numero considerevole di citazioni.

- **Responsabilità della collaborazione scientifica con Kosan Biosciences Inc (2000-2006)**

Il prof Rastelli è stato responsabile scientifico UNIMORE della collaborazione con la ditta farmaceutica Kosan Biosciences Inc (Hayward, CA USA) finalizzata alla progettazione di inibitori di Hsp90 e protein kinasi, due target rilevanti per lo sviluppo di farmaci antitumorali. Gli studi hanno riguardato la progettazione e sviluppo di inibitori di Hsp90 a struttura polichetidica derivanti dalla geldanamicina (quali 17-DMAG), e di inibitori irreversibili delle proteine chinasi a struttura macrolattonica (quali ipotemicina e suoi derivati).

Le ricerche hanno condotto a numerose pubblicazioni su riviste internazionali peer-reviewed, una delle quali ha ricevuto il premio Bioorganic & Medicinal Chemistry Most Cited Paper 2003-2006 Award, e due hanno ricevuto l'attestazione di ScienceDirect Top 25 Hottest Article. Il Prof. Rastelli è anche co-autore di due strutture cristallografiche depositate nel Protein Data Bank (codici 1OSF e 3C9W). La ricerca è stata supportata finanziariamente da Kosan stessa attraverso vari contratti di ricerca con UNIMORE, di cui il prof Rastelli è stato responsabile.

La collaborazione ha inoltre posto le basi per il finanziamento del progetto FISR (Fondo Integrativo Speciale per la Ricerca del MIUR)1504 Ric, 2002-2004 "Molecular modeling and design of pharmaceutically active polyketides", di cui il Prof Rastelli è stato coordinatore.

- **Coordinazione del progetto AIRC IG 5049 "Novel irreversible protein kinase inhibitors targeting a conserved active site cysteine" (2008-2010)**

Il progetto ha avuto come obiettivo la progettazione, sintesi e valutazione biologica e farmacologica di inibitori irreversibili in grado di legarsi covalentemente ad una cisteina presente nel sito ATP-asico di alcune proteine chinasi. I partecipanti al team hanno incluso i gruppi di ricerca del Prof Pierfranco Conte (UNIMORE) e Prof Mauro Freccero (UNIPV). Il progetto ha portato all'identificazione di nuovi inibitori irreversibili ad attività antitumorale, varie pubblicazioni scientifiche e contatti con aziende farmaceutiche per lo sviluppo dei composti ottenuti.

- **Responsabilità dell'unità operativa di drug design del progetto europeo WISDOM (Wide in Silico Docking on Malaria) (wisdom.healthgrid.org) (2006-2009)**

Il progetto WISDOM si inserisce all'interno del progetto europeo EGEE (Enabling Grids for E-science). Sul progetto il prof Rastelli ha collaborato con Vincent Breton (CNRS, Francia), Martin Hofmann (Fraunhofer Institute SCAI, Bonn), Doman Kim (Chonnam National University, South Korea), ed altri ricercatori appartenenti ad istituzioni internazionali. Il progetto è basato sullo screening virtuale di molecole effettuato su piattaforme di calcolo avanzato GRID, con l'obiettivo

di identificare nuove molecole ad attività antimalarica. Tale progetto ha portato ad un brevetto, varie pubblicazioni, una delle quali selezionata come “Top 25 Hottest Article in Computer Science 2007”. Ha generato un numero elevato di composti biologicamente attivi rispetto a target biologici importanti per la terapia antimalarica.

- **Coordinazione del progetto Spinner 2013, Idee imprenditoriali innovative e/o ad alto contenuto di conoscenza. Progetto “BEAR” (Binding Estimation After Refinement) (2009-2010)**

Il progetto BEAR (Binding Estimation After Refinement), finanziato attraverso fondi regionali “Spinner 2013”, ha riguardato lo sviluppo di una piattaforma computazionale di screening virtuale di potenziali farmaci. In particolare, il gruppo di ricerca del Prof Rastelli ha messo a punto una piattaforma computazionale per lo screening di farmaci mediante l’integrazione di metodiche di docking, dinamica molecolare e metodi di scoring basati sul calcolo dell’energia libera di binding. Il progetto ha consentito di avviare contatti e consolidare partnerships con varie imprese presenti sul territorio nazionale. Ha consentito di migliorare la metodologia BEAR, già avviata precedentemente nel laboratorio di ricerca del Prof Rastelli. La ricerca è proseguita anche dopo il progetto Spinner, attraverso l’ulteriore messa a punto del prototipo ed applicazione a vari target farmacologici. Nel complesso, la ricerca ha portato a numerose pubblicazioni scientifiche peer-reviewed, due pubblicazioni divulgative, la partecipazione a varie attività di trasferimento tecnologico tra cui eventi di promozione e fiere e la redazione del business plan per una costituenda spin-off accademica.

- **Coordinazione del progetto Spinner 2013, Percorsi di mobilità e collaborazione internazionale. Progetto “DynPharmaGel” (2012-2013)**

Si è trattato di un progetto regionale di trasferimento tecnologico finanziato nel 2012 da “Spinner 2013” (Percorsi di mobilità e collaborazione internazionale) e coordinato dal Prof Rastelli. Si inserisce all’interno di una collaborazione promossa dal partner aziendale ProLynx LLC di San Francisco, CA USA. Il progetto ha previsto la mobilità della Dott.ssa Miriam Sgobba verso gli USA (ProLynx, UCSF), ed era mirato a sviluppare ed applicare modelli di simulazione per l’ottimizzazione del rilascio controllato di farmaci da supporti di idrogel Tetra-PEG. Al progetto hanno partecipato il Prof Rastelli, il Prof Daniel Santi (CEO di ProLynx LLC, ex professore ordinario di biochimica e chimica farmaceutica alla UCSF e fondatore e/o cofondatore e CEO di cinque aziende biotecnologiche negli USA) e il Prof Andrej Sali (Department of Pharmaceutical Chemistry, University of California San Francisco, uno dei massimi esperti a livello internazionale di simulazione di sistemi macromolecolari complessi). Il progetto ha portato a sistemi di delivery ottimizzati descritti in una pubblicazione congiunta su *Macromolecules* 2015, 48, 7359-7369 (IF=5.8).

- **Coordinazione del progetto AIRC IG 15993 “Design and development of CDK2 and EGFR type III allosteric inhibitors as anticancer drugs” (2015-2017)**

Il progetto ha avuto come obiettivo la progettazione, sintesi chimica e valutazione biologica e farmacologica di inibitori allosterici di tipo III delle proteine chinasi CDK2 ed EGFR ad attività antitumorale. Il progetto triennale è stato coordinato dal Prof Rastelli. I partecipanti al team hanno incluso i gruppi di ricerca del Prof Passarella (UNIMI), Dott Broggin (Istituto di Ricerche Farmacologiche “Mario Negri” di Milano), Dott.ssa Storici (Elettra Sincrotrone Trieste) e Prof. Battistutta (UNIPD). Lo studio ha portato ad un elevato numero di molecole sintetizzate e risultate biologicamente attive come inibitori allosterici di CDK2 e di EGFR nella sua forma nativa e/o mutata (T790M/L858R). I risultati sono oggetto di numerose pubblicazioni scientifiche.

- **Coordinazione del progetto “Research study on anticancer drugs targeting the CDK2 and EGFR proteins” finanziato dalla Fondazione Nando Peretti (2013-2015)**

Il progetto ha avuto come obiettivo lo studio delle proteine CDK2 ed EGFR e la progettazione, sintesi e valutazione dell’attività antitumorale di inibitori che si legano ad una tasca allosterica prossima all’elica α C regolatoria di queste chinasi. Il Prof Rastelli è stato il coordinatore del progetto finanziato dalla Fondazione Nando Peretti (Prot. NPF 2013-25). I partecipanti al team hanno incluso i gruppi di ricerca del Prof Passarella (UNIMI) e Dott Brogginì (Istituto di Ricerche Farmacologiche “Mario Negri” di Milano).

- **Responsabilità scientifica dell’unità di ricerca UNIMORE nel progetto H2020-MSCA-ITN-EID “Big Data in Chemistry” (BIGCHEM) (2016-2019)**

Dal 2016 al 2019 il prof Rastelli è stato responsabile scientifico dell’unità di ricerca UNIMORE all’interno del progetto Marie Skłodowska-Curie Innovative Training Networks (ITN-EID) H2020-MSCA-ITN-EID dal titolo “*Big Data in Chemistry*”, acronimo “*BIGCHEM*” (Project Id. 676434).

Il progetto è stato sviluppato da un consorzio di nove unità: Dr I.V. Tetko (Helmholtz Zentrum Munchen, DE, Principal Investigator), Prof. J Bajorath (University of Bonn, DE), Dr J. Kriegl (Boehringer Ingelheim GmbH, DE), Dr B. Klebl (Lead Discovery Center GmbH, DE), Prof. A. Varnek (University of Strasbourg, FR), Prof. Rastelli (UNIMORE, IT), Dr H. Chen (AstraZeneca, SE), Prof. JL Reymond (University of Bern, CH), Prof. G. Schneider (ETH Zurich, CH). A queste si aggiungono varie Partner Organizations.

L’ambito principale di ricerca del gruppo del prof Rastelli all’interno di questo progetto ha riguardato l’utilizzo e l’analisi di big data e lo sviluppo di metodi computazionali *ad hoc* per la “polifarmacologia”, ormai diventata un hot topic nel campo del drug discovery. Nel complesso, la ricerca ha portato a numerose pubblicazioni scientifiche peer-reviewed, molteplici attività di training e scuole per dottorandi, e al consolidamento di un network di eccellenza a livello europeo.

- **Coordinazione del progetto FAR 2019 “LigAdvisor: a web server for drug design based on big data” finanziato dall’Università di Modena e Reggio Emilia attraverso il Fondo di Ateneo per la Ricerca (2019-2022)**

Il progetto ha l’obiettivo di sviluppare una piattaforma web per la progettazione di ligandi basata su big data di natura chimica, strutturale, biologica e clinica. La piattaforma, già disponibile all’indirizzo www.mmddlab.unimore.it/site/home/ligadvisor.html e pubblicata sulla prestigiosa rivista *Nucleic Acids Research*, consente di analizzare big data ai fini dell’identificazione di nuovi target biologici, l’ottimizzazione di composti hit, il riposizionamento di farmaci e predizioni di attività multitarget.

- **Coordinazione del progetto AIRC IG 23635 “Targeting metastatic castrate-resistant prostatic cancer with HDAC6/Hsp90 dual inhibitors” (2020-2025)**

Il progetto, recentemente finanziato da AIRC, verte sulla progettazione, sintesi e valutazione biologica *in vitro* ed *in vivo* di candidati farmaci con meccanismo di inibizione duale di HDAC6 e Hsp90, due target di notevole rilevanza per il trattamento dei tumori alla prostata. Il progetto prevede la progettazione computazionale di inibitori duali degli enzimi Hsp90 e HDAC6, la loro sintesi chimica, e la loro sperimentazione biologica e farmacologica *in vitro* ed *in vivo*. Tali studi si inseriscono all’interno di un filone di ricerca più ampio che, da vari anni, riveste un ruolo molto rilevante nelle attività del laboratorio di ricerca del prof Rastelli, cioè quello della “polifarmacologia”.

15. *Attività di trasferimento tecnologico*

Nell’ambito delle iniziative di trasferimento tecnologico il Prof Rastelli è stato coordinatore di due progetti Spinner 2013 (Regione Emilia Romagna): il progetto “BEAR” Idee imprenditoriali

innovative e/o ad alto contenuto di conoscenza 2009-2010, e il progetto “DynPharmaGel” Percorsi di mobilità e collaborazione internazionale 2012-2013. Ha partecipato a vari eventi e fiere (MipTec 2010, ExpoSanità2010, IBS2010) e alla StartCup2010 (competizione per i migliori progetti innovativi imprenditoriali). Ha acquisito e consolidato vari contatti con aziende farmaceutiche italiane, tra cui Recordati con la quale ha attivato un contratto. Assieme ai suoi collaboratori il Prof Rastelli ha così posto le basi per la costituzione di una spin-off accademica. Nell’ambito del progetto Spinner BEAR ha inoltre partecipato ai percorsi di accrescimento delle competenze in “Gestione delle Risorse umane”, “Business plan” e “Project management” (2010). Infine è co-autore di un brevetto su farmaci antimalarici inibitori della Plasmeppsina II (2009) scaturito dal progetto europeo WISDOM.

Nell’ambito delle azioni di promozione commerciale della tecnologia BEAR, nel 2010 il Prof Rastelli ha inoltre pubblicato due report tecnologici, uno su “La Chimica & L’Industria” (BEAR: una piattaforma di screening virtuale al servizio delle aziende farmaceutiche e biotecnologiche, *La Chimica & L’Industria* 2010, 10, 124-125) e l’altro su “LAB-Il mondo del laboratorio” (Una piattaforma di screening virtuale al servizio delle aziende farmaceutiche e biotecnologiche, *LAB-Il mondo del laboratorio* 2010, 7, 120-121).

Nello specifico, le attività di trasferimento tecnologico possono essere così elencate:

- Attivazione di un “Curriculum industriale” all’interno della Scuola di Dottorato “Clinical and Experimental Medicine” di UNIMORE a seguito dell’approvazione del finanziamento BIGCHEM (Big Data in Chemistry) progetto H2020-MSCA-ITN-EID European Industrial Doctorates (2016-2019) Project Id. 676434, che prevede la supervisione congiunta di un Dottorando di ricerca Marie Curie da parte di UNIMORE (Tutor Prof Rastelli) e di AstraZeneca (Tutor Dr Chen).
- Brevetto: Doman Kim, Hee Kyoung Kang, Do Won Kim, Giulio Rastelli, Ana-Lucia Da Costa, Vinod Kasam, Vincent Breton. “*Pharmaceutical composition for preventing and treating malaria containing compounds that inhibit Plasmeppsina II activity, and method of treating malaria using the same*”. 2009, WO2009131384 A2, PCT application PCT/KR2009/002114.
- Coordinatore dell’azione “Spinner 2013” finanziata dalla Regione Emilia Romagna dal titolo “BEAR”, all’interno delle “Idee imprenditoriali innovative e/o ad alto contenuto di conoscenza 2009-2010”. Spinner è un’azione del Programma Operativo Regionale (POR) 2007-2013 del Fondo Sociale Europeo (FSE), Asse IV Capitale Umano, Obiettivo 2 “Competitività regionale e Occupazione” promossa dall’Assessorato Scuola, Formazione professionale, Università e ricerca, Lavoro della Regione Emilia-Romagna.
- Stesura di un business plan e analisi di mercato per la creazione di una spin off accademica mirata ad offrire servizi di screening virtuale di farmaci alle imprese.
- Partecipazione ad eventi di trasferimento tecnologico: MipTec 2010 (www.miptec.ch/miptec2011/miptec-2010.html). Partecipazione all’evento in qualità di relatore, ed azione di promozione della piattaforma di screening virtuale “BEAR”
- Partecipazione ad eventi di trasferimento tecnologico: IBS 2010 (International Biotechnology Symposium and Exhibition 2010). Azione di promozione della piattaforma di screening virtuale “BEAR”. Presentazione orale tenuta dal Dott. M.D. Parenti, facente parte della compagine del progetto Spinner BEAR, dal titolo “Binding estimation after refinement: BEARing out an innovative virtual screening methodology” (MD. Parenti, G. Degliesposti, C. Portioli, G. Rastelli. *Journal of Biotechnology* 2010, 150, 94-95. Supplement November 2010. “14th International Biotechnology Symposium and Exhibition”, Rimini (Italy) 14-18 September 2010. Comunicazione orale Atti #M.9).
- Partecipazione ad eventi di trasferimento tecnologico: allestimento di uno stand ad Expo Sanità 2010 (www.exposanita.it) all’interno dello stand ASTER-Rete Alta Tecnologia-Piattaforma Scienze della Vita, presso il Salone MIT al Pad. 26 per la promozione della tecnologia “BEAR”. Bologna Fiere 26-29 Maggio 2010.

- Selezione di BEAR in qualità di finalista per la partecipazione alla StartCup2010 (competizione per i migliori progetti innovativi imprenditoriali). StartCup é la business plan competition dell'Emilia-Romagna, affiliata al PNI (Premio Nazionale per l'Innovazione). La competizione consiste in una gara tra progetti imprenditoriali innovativi per la creazione di start-up attive sul territorio regionale. Produzione di un flyer illustrante i servizi offerti da BEAR e distribuzione del flyer alle aziende farmaceutiche e biotecnologiche italiane.
- Partecipazione ai percorsi di accrescimento delle competenze in “Gestione delle Risorse umane”, “Business plan” e “Project management” facenti parte del percorso Spinner (2010).
- Nell'ambito delle azioni di promozione commerciale della tecnologia BEAR, nel 2010 il Prof Rastelli ha pubblicato due report tecnologici, uno su “La Chimica & L'Industria” (BEAR: una piattaforma di screening virtuale al servizio delle aziende farmaceutiche e biotecnologiche, *La Chimica & L'Industria* 2010, 10, 124-125) e l'altro su “LAB-Il mondo del laboratorio” (Una piattaforma di screening virtuale al servizio delle aziende farmaceutiche e biotecnologiche), *LAB-Il mondo del laboratorio* 2010, 7, 120-121).
- Coordinatore di un'azione “Spinner 2013” finanziata dalla Regione Emilia Romagna dal titolo “DynPharmaGel”, all'interno dei “Percorsi di mobilità e collaborazione internazionale 2012-2013”. Spinner è un'azione del Programma Operativo Regionale (POR) 2007-2013 del Fondo Sociale Europeo (FSE), Asse IV Capitale Umano, Obiettivo 2 "Competitività regionale e Occupazione" promossa dall'Assessorato Scuola, Formazione professionale, Università e ricerca, Lavoro della Regione Emilia-Romagna. Il progetto ha previsto la mobilità della Dott.ssa Miriam Sgobba verso la ditta ProLynx LLC (San Francisco, CA www.prolynxllc.com) e la collaborazione internazionale con ProLynx (Daniel V. Santi) e UCSF (Andrej Sali). L'azione ha permesso di sviluppare una tecnologia computazionale in grado di predire il rilascio di farmaci da Tetra-PEG hydrogels degradabili, e poi di applicarla a sistemi reali complessi. I risultati scientifici sono pubblicati sulla rivista *Macromolecules* (Reid, M. Sgobba, B. Raveh, G. Rastelli, A. Sali, D.V. Santi. Analytical and simulation-based models for drug release and gel-degradation in a Tetra-PEG hydrogel drug-delivery system. *Macromolecules* 2015, 48, 7359-7369) IF=5.8.

16. Comunicazioni orali ad invito a congressi nazionali e internazionali, scuole e aziende

Il prof. Rastelli ha tenuto numerose comunicazioni orali ad invito a congressi nazionali, internazionali, scuole ed aziende.

17. Attività didattica

Dall'AA 1996-1997 all'AA 2003-2004 il Prof. Rastelli ha svolto la seguente attività didattica in maniera continuativa presso la Facoltà di Farmacia e presso la Facoltà di Scienze M.F.N. dell'Università di Modena e Reggio Emilia:

AA 1996-1997

- Assistenza al laboratorio di “Analisi dei medicinali I” per i CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche e in Farmacia.

AA 1997-1998

- Assistenza al laboratorio di “Analisi dei medicinali I” per i CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche e in Farmacia.
- Moduli didattici integrativi per il corso di “Metodologie avanzate in chimica farmaceutica”, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.

AA 1998-1999

- Assistenza al laboratorio di “Analisi dei medicinali II” per i CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche e in Farmacia.

- Seminari integrativi per i corsi di “*Progettazione e sintesi di farmaci*” e “*Basi molecolari dell’attività dei farmaci*” del CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.

AA 1999-2000

- Corso di “*Progettazione e sintesi di farmaci*”, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.

AA 2000-2001

- Corso di “*Progettazione e sintesi di farmaci*”, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.
- Corso di “*Basi molecolari dell’attività dei farmaci*”, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.

AA 2001-2002

- Corso di “*Basi molecolari dell’attività dei farmaci*”, 50 ore, CdL in Biotecnologie, indirizzo Biotecnologie Farmaceutiche, 5° anno V.O.

AA 2002-2003

- Corso di “*Basi molecolari dell’attività dei farmaci*”, 50 ore, CdL in Biotecnologie, indirizzo Biotecnologie Farmaceutiche, 5° anno V.O. (Facoltà di Scienze MFN, Corso interfacoltà)
- Corso di “*Struttura delle biomolecole*”, 4CFU, CdL in Biotecnologie Farmaceutiche 3° anno N.O.

AA 2003-2004

- Corso di “*Basi molecolari dell’attività dei farmaci*”, 50 ore, CdL in Biotecnologie, indirizzo Biotecnologie Farmaceutiche, 5° anno V.O. (Facoltà di Scienze MFN, Corso interfacoltà)
- Corso di “*Struttura delle biomolecole*”, 4CFU, CdL in Biotecnologie Farmaceutiche, 3° anno N.O.
- Corso di “*Proprietà molecolari dei farmaci*”, 3CFU, CdL in Biotecnologie Farmaceutiche 2° anno N.O.

Dall’AA 2004-2005 all’AA 2012-2013 il Prof. Rastelli ha svolto la seguente attività didattica in maniera continuativa presso la Facoltà di Bioscienze e Biotecnologie e presso la Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie dei Prodotti per la Salute dell’Università di Modena e Reggio Emilia:

AA 2004-2005

- Corso di “*Struttura delle biomolecole*”, 4CFU, CdL in Biotecnologie Farmaceutiche, 3° anno N.O.
- Corso di “*Proprietà molecolari dei farmaci*”, 3CFU, CdL in Biotecnologie Farmaceutiche 2° anno N.O.

AA 2005-2006

- Corso di “*Proprietà molecolari dei farmaci*” 5CFU, CdL triennale in Biotecnologie indirizzo farmaceutico, 2° anno.
- Corso di “*Struttura delle biomolecole*” 4CFU, CdL triennale in Biotecnologie indirizzo farmaceutico, 3° anno.
- Corso di “*Progettazione e sviluppo del farmaco*” 4CFU, CdL specialistica in Biotecnologie Farmaceutiche, 1° anno.

AA 2006-2007

- Corso di “*Proprietà molecolari dei farmaci*” 5CFU, CdL triennale in Biotecnologie indirizzo farmaceutico, 2° anno.
- Corso di “*Struttura delle biomolecole*” 4CFU, CdL triennale in Biotecnologie indirizzo farmaceutico, 3° anno.
- Corso di “*Progettazione e sviluppo del farmaco*” 4CFU, CdL specialistica in Biotecnologie Farmaceutiche, 1° anno.
- Corso di “*Gestione della proprietà intellettuale*” 2CFU, Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie dei Prodotti per la Salute.

- Corso di “*Molecular modelling e progettazione razionale di molecole biologicamente attive attraverso metodi computazionali*” 2CFU, Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie dei Prodotti per la Salute.
- “*Gestione dell’informazione scientifica*” modulo 1CFU, Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie dei Prodotti per la Salute.

AA 2007-2008

- Corso di “*Proprietà molecolari dei farmaci*” 5CFU, CdL triennale in Biotecnologie indirizzo farmaceutico, 2° anno.
- Corso di “*Struttura delle biomolecole*” 4CFU, CdL triennale in Biotecnologie indirizzo farmaceutico, 3° anno.
- Corso di “*Progettazione del farmaco*” 4CFU, CdL specialistica in Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche, 1° anno.
- Corso di “*Gestione della proprietà intellettuale*” 2CFU, Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie dei Prodotti per la Salute.
- Corso di “*Molecular modelling e progettazione razionale di molecole biologicamente attive attraverso metodi computazionali*” 2CFU, Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie dei Prodotti per la Salute.
- “*Gestione dell’informazione scientifica*” modulo 1CFU, Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie dei Prodotti per la Salute.

AA 2008-2009

- Corso di “*Proprietà molecolari dei farmaci*” 5CFU, CdL triennale in Biotecnologie indirizzo farmaceutico, 2° anno.
- Corso di “*Struttura delle biomolecole*” 4CFU, CdL triennale in Biotecnologie indirizzo farmaceutico, 3° anno.
- Corso di “*Progettazione del farmaco*” 7CFU, CdL specialistica in Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche, 1° anno.
- Corso di “*Gestione della proprietà intellettuale*” 2CFU, Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie dei Prodotti per la Salute.
- Corso di “*Molecular modelling e progettazione razionale di molecole biologicamente attive attraverso metodi computazionali*” 2CFU, Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie dei Prodotti per la Salute.
- “*Gestione dell’informazione scientifica*” modulo 1CFU, Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie dei Prodotti per la Salute.

AA 2009-2010

- Corso di “*Struttura delle biomolecole*” 4CFU, CdL triennale in Biotecnologie indirizzo farmaceutico, 3° anno.
- Corso di “*Progettazione del farmaco*” 7CFU, CdL specialistica in Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche, 1° anno.
- Corso di “*Ricerca e sviluppo di nuovi farmaci antitumorali*” 2CFU, CdL specialistica in Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche, 2° anno
- Corso di “*Gestione della proprietà intellettuale*” 2CFU, Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie dei Prodotti per la Salute.
- Corso di “*Molecular modelling e progettazione razionale di molecole biologicamente attive attraverso metodi computazionali*” 2CFU, Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie dei Prodotti per la Salute.
- “*Gestione dell’informazione scientifica*” modulo 1CFU, Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie dei Prodotti per la Salute.

AA 2010-2011

- Corso di “*Progettazione del farmaco*” 6CFU, CdL magistrale in Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche, 1° anno.
- Corso di “*Ricerca e sviluppo di nuovi farmaci antitumorali*” 2CFU, CdL magistrale in Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche, 2° anno

AA 2011-2012

- Corso di “*Progettazione del farmaco*” 6CFU, CdL magistrale in Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche, 1° anno.
- Corso di “*Ricerca e sviluppo di nuovi farmaci antitumorali*” 2CFU, CdL magistrale in Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche, 2° anno

AA 2012-2013

- Corso di “*Progettazione del farmaco*” 6CFU, CdL magistrale in Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche, 1° anno.
- Corso di “*Ricerca e sviluppo di nuovi farmaci antitumorali*” 2CFU, CdL magistrale in Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche, 2° anno

Dall’AA 2013-2014 ad oggi il Prof. Rastelli ha svolto la seguente attività didattica in maniera continuativa presso il Dipartimento di Scienze della Vita dell’Università di Modena e Reggio Emilia:

AA 2013-2014

- Corso di “*Progettazione del farmaco*” 6CFU, CdL magistrale in Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche, 1° anno.
- Corso di “*Analisi dei Medicinali I*” 5CFU, CdL in Farmacia, 2° anno

AA 2014-2015

- Corso di “*Analisi dei Medicinali*” 9CFU (5CFU di teoria e 4CFU di laboratorio), CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 2° anno

AA 2015-2016

- Corso di “*Analisi dei Medicinali*” 9CFU (5CFU di teoria e 4CFU di laboratorio), CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 2° anno

AA 2016-2017

- Corso di “*Analisi dei Medicinali*” 5CFU (teoria), CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 2° anno.
- Corso di “*Progettazione dei Farmaci*” 4CFU, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 4° anno.

AA 2017-2018

- Corso di “*Chimica Farmaceutica e Tossicologica I*” 10CFU, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 3° anno.
- Corso di “*Analisi dei Medicinali*” 5CFU (teoria), CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 2° anno.
- Corso di “*Progettazione dei Farmaci*” 4CFU, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 4° anno.

AA 2018-2019

- Corso di “*Chimica Farmaceutica e Tossicologica I*” 10CFU, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 3° anno.
- Corso di “*Analisi dei Medicinali*” 5CFU (teoria), CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 2° anno.
- Corso di “*Progettazione dei Farmaci*” 4CFU, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 4° anno.

AA 2019-2020

- Corso di “*Chimica Farmaceutica e Tossicologica I*” 10CFU, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 3° anno.
- Corso di “*Analisi dei Medicinali*” 5CFU (teoria), CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 2° anno.
- Corso di “*Progettazione dei Farmaci*” 4CFU, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 4° anno.

AA 2020-2021

- Corso di “*Chimica Farmaceutica e Tossicologica I*” 10CFU, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 3° anno.
- Corso di “*Analisi dei Medicinali*” 5CFU (teoria), CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 2° anno.
- Corso di “*Progettazione dei Farmaci*” 4CFU, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 4° anno.

Infine, il Prof. Rastelli ha seguito in qualità di relatore numerosi studenti nella preparazione ed elaborazione di tesi sperimentali di laurea. Infine è stato supervisore di numerosi studenti di Dottorato di ricerca in discipline chimico-farmaceutiche.

19. Elenco delle pubblicazioni

- 1) L. Pinzi, A. Tinivella, **G. Rastelli***. Chemoinformatics analyses of Tau ligands reveal key molecular requirements for the identification of potential drug candidates against Tauopathies. *Molecules* 2021, 26, 5039. (IF=4.411)
- 2) A. Citarella, D. Moi, L. Pinzi, D. Bonanni, **G. Rastelli***. Hydroxamic Acid Derivatives: from Synthetic Strategies to Medicinal Chemistry Applications. *ACS Omega* 2021, 6, 21843-21849. (IF=3.512)
- 3) L. Pinzi, F. Foschi, M.S. Christodoulou, D. Passarella, G. **Rastelli***. Design and synthesis of Hsp90 inhibitors with B-Raf and PDHK1 multi-target activity. *ChemistryOpen* 2021, in press. (IF=2.911)
- 4) P. Linciano, L. Pinzi, S. Belluti, R. Benedetti, D. Moi, L. Altucci, S. Franchini, C. Imbriano, C. Sorbi,* **G. Rastelli***. Inhibitors of Histone Deacetylase 6 based on a novel 3-hydroxy-isoxazole zinc binding group. *J. Enz. Inh. Med. Chem.*, in press 2021 (IF=5.051)
- 5) D. Bonanni, A. Citarella, D. Moi, L. Pinzi, E. Bergamini, **G. Rastelli***, Dual Targeting Strategies on Histone Deacetylase 6 (HDAC6) and Heat Shock Protein 90 (Hsp90). *Curr. Med. Chem.* 2021, in press. (IF=4.53)
- 6) L.G. Iacovino, L. Pinzi, G. Facchetti, B. Bortolini, M. S. Christodoulou, C. Binda, **G. Rastelli**, I. Rimoldi, D. Passarella, M. L. Di Paolo, L. Dalla Via. Promising Non-cytotoxic Monosubstituted Chalcones to Target Monoamine Oxidase-B. *ACS Med. Chem. Lett.* 2021, 12, 1151-1158. (IF=4.345)

- 7) L. Pinzi, A. Tinivella, L. Gagliardelli, D. Beneventano, **G. Rastelli***. LigAdvisor: a versatile and user-friendly web-platform for drug design, *Nucleic Acids Res.* 2021, 49, W326-W335. (IF=16.971)
- 8) V. Brighenti, R. Iseppi, L. Pinzi, A. Mincuzzi, A. Ippolito, P. Messi, S. M. Sanzani, **G. Rastelli***, **F. Pellati*** Antifungal Activity and DNA Topoisomerase Inhibition of Hydrolisable Tannins from *Punica granatum L.* *Int. J. Mol. Sci.* 2021, 22, 4175. <https://doi.org/10.3390/ijms22084175> (IF=5.923)
- 9) L. Pinzi, A. Tinivella, F. Caporuscio, **G. Rastelli***. Drug repurposing and polypharmacology to fight SARS-CoV-2 through inhibition of the main protease. *Front. Pharmacol.* 2021, 12:636989. doi: 10.3389/fphar.2021.636989 (IF=5.81)
- 10) A. Tinivella, L. Pinzi, **G. Rastelli***. Prediction of activity and selectivity profiles of human Carbonic Anhydrase inhibitors using machine learning classification models. *J. Cheminform.* 2021, 13:18. (IF=5.54)
- 11) P. Linciano, R. Benedetti, L. Pinzi, F. Russo, U. Chianese, C. Sorbi, L. Altucci, **G. Rastelli**, L. Brasili, S. Franchini. Investigation of the effect of different linker chemotypes on the inhibition of histone deacetylases (HDACs). *Bioorg. Chem.* 2021, 106, 104462. (IF=5.275)
- 12) M. Gütschow, J.J. Vanden Eynde, J. Jampilek, C. Kang, [...], **G. Rastelli**, [...], M. Miloso, J. Rautio, D. Muñoz-Torrero. Breakthroughs in Medicinal Chemistry: New Targets and Mechanisms, New Drugs, New Hopes-7 *Molecules* 2020, 25, 2968; doi:10.3390/molecules25132968. (IF=3.267)
- 13) L. Pinzi, R. Benedetti, L. Altucci, **G. Rastelli***. Design of Dual Inhibitors of Histone Deacetylase 6 and Heat Shock Protein 90. *ACS Omega* 2020, 5, 11473-11480. (IF=2.584).
- 14) **G. Rastelli***, F. Pellati, L. Pinzi, M.C. Gamberini. Repositioning natural products in drug discovery. *Molecules* 2020, 25, 1154; doi:10.3390/molecules25051154 (IF=3.267).
- 15) L. Pinzi, **G. Rastelli***. Identification of target associations for polypharmacology from analysis of crystallographic ligands of the Protein Data Bank. *J Chem Inf. Model.* 2020, 60, 372-390. (IF=3.966)
- 16) J.J. Vanden Eynde, A.A. Mangoni, J. Rautio, J. Leprince, Y.T. Azuma, A.T. García-Sosa, C. Hulme, [...], **G. Rastelli**, [...], S. Collina, R.C. Guedes, D. Muñoz-Torrero. Breakthroughs in medicinal chemistry: New targets and mechanisms, new drugs, new hopes-6. *Molecules* 2019, 25, 119; doi:10.3390/molecules25010119. (IF=3.267).
- 17) L. Pinzi, **G. Rastelli**. Molecular Docking: Shifting Paradigms in Drug Discovery. *Int. J. Mol. Sci.* 2019, 20, 4331. doi: 10.3390/ijms20184331 (IF=4.183)
- 18) M.L. Di Paolo, M.S. Christodoulou, A.M. Calogero, L. Pinzi, **G. Rastelli**, D. Passarella, G. Cappelletti, L. Dalla Via. 2-Phenylloxazole-4-carboxamide as new scaffold for selective inhibition of human monoamine oxidase B. *ChemMedChem* 2019, 14, 1641-1652. (IF=3.016)
- 19) L. Pinzi, C. Lherbet, M. Baltas, F. Pellati, **G. Rastelli***. In Silico Repositioning of Cannabigerol as a Novel Inhibitor of the Enoyl Acyl Carrier Protein (ACP) Reductase (InhA). *Molecules* 2019, 24, 2567-2575. (IF=3.06)
- 20) **G. Rastelli***, L. Pinzi. Refinement and rescoring of virtual screening results. *Front. Chem.* 2019, 7:498. (IF=3.782)
- 21) D. Graziani, S. Caligari, E. Callegari, C. De Toma, M. Longhi, F. Frigerio, R. Dileria, S. Menegon, L. Pinzi, L. Pirona, V. Tazzari, A.E. Valsecchi, G. Vistoli, **G. Rastelli**, C. Riva. Evaluation of Amides, Carbamates, Sulfonamides, and Ureas of 4-Prop-2-ynylidenecycloalkylamine as Potent, Selective, and Bioavailable Negative Allosteric Modulators of Metabotropic Glutamate Receptor 5. *J. Med. Chem.* 2019, 62, 1246-1273. (IF=6.253)
- 22) A. Anighoro, L. Pinzi, **G. Rastelli**, J. Bajorath. Virtual Screening for dual Hsp90/B-Raf inhibitors, in: Roy K (Eds.): Multi-Target Drug Design Using Chem-Bioinformatic

- Approaches. *Methods in Pharmacology and Toxicology*. Humana Press, New York, NY, 2019 pp. 355-365. DOI 10.1007/7653_2017_1
- 23) A. Tinivella, **G. Rastelli***. Investigating the selectivity of allosteric inhibitors for mutant T790M EGFR over wild type using molecular dynamics and binding free energy calculations. *ACS Omega* 2018, 3, 16556-16562 (IF=2.584).
 - 24) L. Carlino, M.S. Christodoulou, V. Restelli, F. Caporuscio, F. Foschi, M.S. Semrau, E. Costanzi, A. Tinivella, L. Pinzi, L. Lo Presti, R. Battistutta, P. Storici, M. Broggin, D. Passarella, **G. Rastelli***. Structure-Activity Relationships of Hexahydrocyclopenta[c]quinoline Derivatives as Allosteric Inhibitors of CDK2 and EGFR. *ChemMedChem* 2018,13, 2627-2634. (IF=3.009)
 - 25) L. Pinzi, F. Caporuscio, **G. Rastelli***. Selection of protein conformations for structure-based polypharmacology studies. *Drug Discov. Today* 2018, 23, 1889-1896. (IF=6.848)
 - 26) F. Caporuscio, A. Tinivella, V. Restelli, M.S. Semrau, L. Pinzi, P. Storici, M. Broggin, **G. Rastelli***. Identification of small-molecule EGFR allosteric inhibitors by high-throughput docking. *Future Med. Chem.* 2018, 10, 1545-1553.(IF=3.969)
 - 27) N. Sturm, A. Tinivella, **G. Rastelli***. Exploration and Comparison of the Geometrical and Physicochemical Properties of an α C Allosteric Pocket in the Structural Kinome. *J. Chem. Inf. Model.* 2018, 58, 1094-1103. (IF=3.804)
 - 28) L. Pinzi, A. Anighoro, J. Bajorath, **G. Rastelli***. Identification of 4-aryl-1H-pyrrole[2,3-b]pyridine derivatives for the development of new B-Raf inhibitors. *Chem. Biol. Drug. Des.* 2018, 92, 1382-1386 (IF=2.396).
 - 29) D. Stumpfe, A. Tinivella, **G. Rastelli**, J Bajorath. Promiscuity of inhibitors of human protein kinases at varying data confidence levels and test frequencies. *RSC Adv.* 2017, 7, 41265–41271 (IF=3.289)
 - 30) A. Anighoro, L. Pinzi, G. Marverti, J. Bajorath, **G. Rastelli***. Heat shock protein 90 and serine/threonine kinase B-Raf inhibitors have overlapping chemical space. *RSC Adv.* 2017, 7, 31069–31074 (IF=3.289).
 - 31) E. Bonandi, M.S. Christodoulou, G. Fumagalli, D. Perdicchia, **G. Rastelli**, D. Passarella. The 1,2,3-triazole ring as a bioisostere in medicinal chemistry. *Drug Discov. Today* 2017, 22, 1572-1581 (IF=5.625).
 - 32) **G. Rastelli**. Meet our Editorial Board member, Prof. Giulio Rastelli. *Curr. Med. Chem.* 2017, 24, 951. DOI:10.2174/092986732410170526175445
 - 33) E. March-Vila, L. Pinzi, N. Sturm, A. Tinivella, O. Engkvist, H. Chen, **G. Rastelli***. On the integration of in-silico drug design methods for drug repurposing. *Front. Pharmacol.* 2017, Volume 8, Issue MAY, 23 May 2017, Article number 298. doi: 10.3389/fphar.2017.00298. (IF=4.418)
 - 34) M.S. Christodoulou, F. Caporuscio, V. Restelli, L. Carlino, G. Cannazza, E. Costanzi, C. Citti, L. Lo Presti, P. Pisani, R. Battistutta, M. Broggin, D. Passarella, **G. Rastelli***. Probing an allosteric pocket of CDK2 with small-molecules. *ChemMedChem* 2017, 12, 33-41. (IF=2.98)
 - 35) A. Gabba, S. Robakiewicz, B. Taciak, K. Ulewicz, G. Broggin, **G. Rastelli**, M. Krol, P.V. Murphy, D. Passarella. Synthesis and Biological Evaluation of Migrastatin Macrotriazoles. *Eur. J. Org. Chem.* 2017, 2, 60-69 (IF= 3.068).
 - 36) U.M. Battisti, C. Citti, **G. Rastelli**, L. Pinzi, G. Puja, F. Ravazzini, G. Ciccarella, D. Braghiroli, G. Cannazza. An unexpected reversal in the pharmacological stereoselectivity of benzothiadiazine AMPA positive allosteric modulators: R-(-)-7-Chloro-5-(3-furanyl)-3-methyl-3,4-dihydro-2H-1,2,4-benzothiadiazine 1,1-dioxide. *MedChemComm* 2016, 7, 2410-2417. (IF=2.319).
 - 37) L. Carlino, **G. Rastelli*** Dual Kinase-Bromodomain Inhibitors in Anticancer Drug Discovery: A Structural and Pharmacological Perspective. *J. Med. Chem.* 2016, 59, 9305-9320 (IF=5.589)

- 38) F. Caporuscio, **G. Rastelli***. Exploiting computationally derived out-of-the-box protein conformations for drug design. *Future Med. Chem.* 2016, 8, 1887-1897. (IF=3.345)
- 39) F. Pellati, **G. Rastelli*** Novel and less explored chemotypes of natural origin for the inhibition of Hsp90. *MedChemComm* 2016, 7, 2063-2075. (IF=2.319).
- 40) P. Pisani, F. Caporuscio, L. Carlino, **G. Rastelli***. Molecular Dynamics Simulations and Classical Multidimensional Scaling Unveil New Metastable States in the Conformational Landscape of CDK2. *Plos One* 2016 Apr 21;11(4):e0154066. (IF=3.234)
- 41) M. Marabese, E. Caiola, M.C. Garassino, **G. Rastelli**, G. Settanni, S. Brugnara, M. Broggin, M. Ganzinelli. G48A, a New KRAS Mutation Found in Lung Adenocarcinoma. *J. Thorac. Oncol.* 2016, 11, 1170-1175 (IF=5.282).
- 42) R. Reid, M. Sgobba, B. Raveh, **G. Rastelli**, A. Sali, D.V. Santi. Analytical and simulation-based models for drug release and gel-degradation in a Tetra-PEG hydrogel drug-delivery system. *Macromolecules* 2015, 48, 7359-7369 (IF=5.8)
- 43) **G. Rastelli***, L. Pinzi. Computational polypharmacology comes of age. *Front. Pharmacol.* 2015, 6, 157. doi: 10.3389/fphar.2015.00157 (IF=3.802)
- 44) P. Vincetti, F. Caporuscio, S. Keptein, A. Gioiello, V. Mancino, Y. Suzuki, N. Yamamoto, E. Crespan, A. Lossani, G. Maga, **G. Rastelli**, D. Castagnolo, J. Neyts, P. Leysen, G. Costantino, M. Radi. Discovery of multi-target antivirals acting on both the dengue virus NS5-NS3 interaction and the host Src/Fyn kinases. *J. Med. Chem.* 2015, 58, 4964-4975. (IF=5.447)
- 45) A. Anighoro, D. Graziani, I. Bettinelli, A. Cilia, C. De Toma, M. Longhi, F. Mangiarotti, S. Menegon, L. Pirona, E. Poggesi, C. Riva, **G. Rastelli***. Insights into the interaction of negative allosteric modulators with the metabotropic glutamate receptor 5: discovery and computational modeling of a new series of ligands with nanomolar affinity. *Bioorg. Med. Chem.* 2015, 23, 3040-3058. (IF=2.951).
- 46) A. Anighoro, D. Stumpfe, K. Heikamp, K. Beebe, L.M. Neckers, J. Bajorath, **G. Rastelli*** Computational Polypharmacology Analysis of the Heat Shock Protein 90 Interactome. *J. Chem. Inf. Model.* 2015, 55, 676-686. (IF=4.068)
- 47) C. Micelli, **G. Rastelli***. Histone deacetylases: structural determinants of inhibitor selectivity. *Drug Discov. Today* 2015, 20, 718-735. (IF=6.691)
- 48) S. Raimondi, A. Anighoro, A. Quartieri, A. Amaretti, F.A. Tomás-Barberán, **G. Rastelli**, M. Rossi. Role of bifidobacteria in the hydrolysis of chlorogenic acid. *MicrobiologyOpen* 2015, 4, 41-52. (IF=2.148)
- 49) A. Anighoro, J. Bajorath, **G. Rastelli***. Polypharmacology: Challenges and opportunities in drug discovery. *J. Med. Chem.* 2014, 57, 7874-7887. (IF=5.614)
- 50) **G. Rastelli***, A. Anighoro, M. Chripkova, L. Carrassa, M. Broggin. Structure-Based Discovery of the First Allosteric Inhibitors of Cyclin-Dependent Kinase 2. *Cell Cycle* 2014, 13, 2296-2305. (IF=5.321).
- 51) **G. Rastelli***. Dimerization hot spots in the structure of human Hsp90. *Med. Chem. Commun.*, 2014, 5, 797-801. (IF=2.722).
- 52) A. Anighoro, **G. Rastelli***. BEAR, a molecular docking refinement and rescoring method. *Comput. Mol. Biosci.* 2013, 3, 27-31.
- 53) A. Anighoro, **G. Rastelli***. Enrichment factor analyses on G-protein coupled receptors with known crystal structure. *J. Chem. Inf. Model.* 2013, 53, 739-743. (IF=4.675)
- 54) **G. Rastelli***. Emerging topics in structure-based virtual screening. *Pharm. Res.* 2013, 30, 1458-1463. (IF=4.742).
- 55) L. Palmieri, **G. Rastelli***. α C helix displacement as a general approach for protein kinases allosteric modulation. *Drug Discov. Today* 2013, 18, 407-414. (IF=6.828)
- 56) M. Sgobba, F. Caporuscio, A. Anighoro, C. Portioli, **G. Rastelli***. Application of a post-docking procedure based on MM-PBSA and MM-GBSA on single and multiple protein conformations. *Eur. J. Med. Chem.* 2012, 58, 431-440. (IF=3.346)

- 57) M.D. Parenti, **G. Rastelli***. Advances and applications of binding affinity prediction methods in drug discovery. *Biotechnol. Adv.* 2012, 30, 244-250. (IF=9.646)
- 58) E. Muzzioli, A. Del Rio, **G. Rastelli***. Assessing protein kinase selectivity with molecular dynamics and MM-PBSA binding free energy calculations. *Chem. Biol. Drug Des.* 2011, 78, 252-279. (IF=2.527)
- 59) F. Caporuscio, **G. Rastelli**, C. Imbriano, A. Del Rio. Structure-Based Design of Potent Aromatase Inhibitors by High-Throughput Docking. *J. Med. Chem.* 2011, 54, 4006-4017. (IF=5.207)
- 60) G. Degliesposti, C. Portioli, M.D. Parenti, **G. Rastelli***. BEAR, a novel virtual screening methodology for drug discovery. *J. Biomol. Screen.* 2011, 16, 129-133. (IF=2.5)
- 61) M. Sgobba, R. Forestiero, G. Degliesposti, **G. Rastelli***. Exploring the binding site of C-terminal Hsp90 inhibitors. *J. Chem. Inf. Model.* 2010, 50, 1522-1528 (IF=3.822)
- 62) A. Del Rio, M. Sgobba, M.D. Parenti, G. Degliesposti, R. Forestiero, C. Percivalle, P.F. Conte, M. Freccero, **G. Rastelli***. A Computational Workflow for the Design of Irreversible Inhibitors of Protein Kinases. *J. Comput. Aided Mol. Des.* 2010, 24, 183-194 (IF=3.374)
- 63) **G. Rastelli***, A. Del Rio, G. Degliesposti, M. Sgobba. Fast and accurate predictions of relative binding free energies using MM-PBSA and MM-GBSA. *J. Comput. Chem.* 2010, 31, 797-810. (IF=4.05)
- 64) M.D. Parenti, G. Degliesposti, C. Portioli, **G. Rastelli***. Binding estimation after refinement: BEARing out an innovative virtual screening methodology. *J. Biotechnol.* 2010, 150, Supplement 1, S94-95. DOI 10.1016/j.jbiotec.2010.08.244. (IF=3.045)
- 65) M. Sgobba, **G. Rastelli***. Structure-based and in silico design of Hsp90 inhibitors. *ChemMedChem* 2009, 4, 1399-1409. (IF=3.306)
- 66) A. Del Rio, B.F. Baldi, **G. Rastelli***. Activity prediction and structural insights of Extracellular Signal-Regulated Kinase 2 inhibitors with molecular dynamics simulations. *Chem. Biol. Drug Des.* 2009, 74, 630-635. (IF=2.527)
- 67) V. Kasam, J. Salzeman, M. Botha, A. Dacosta, G. Degliesposti, R. Isea, D. Kim, A. Maass, C. Kenyon, **G. Rastelli**, M. Hofmann-Apitius, V. Breton. WISDOM-II: Screening against multiple targets implicated in malaria using computational grid infrastructures. *Malaria J.* 2009, 8, 88. (IF=3.489)
- 68) **G. Rastelli***, G. Degliesposti, A. Del Rio, M. Sgobba. Binding estimation after refinement, a new automated procedure for the refinement and rescoring of docked ligands in virtual screening. *Chem. Biol. Drug Des.* 2009, 73, 283-286. (IF=2.527)
- 69) G. Degliesposti, V. Kasam, A. Da Costa, H.K. Kang, N. Kim, D.W. Kim, V. Breton, D. Kim, **G. Rastelli***. Design and discovery of plasmepsin II inhibitors using an automated workflow on large scale grids. *ChemMedChem* 2009, 4, 1164-1173.(IF=3.306)
- 70) V. Breton, D. Kim, **G. Rastelli**. "WISDOM, a grid enabled drug discovery initiative against malaria" in *Grid Computing: infrastructure, Service, and Applications*. CRC press, a Taylor & Francis company USA, ISBN 9781420067668. 2009, 359-387.
- 71) **G. Rastelli***, R. Rosenfeld, R. Reid, D. V. Santi. Molecular modeling and crystal structure of ERK2-Hypothemycin complexes. *J. Struct. Biol.* 2008, **164**, 18-23 (IF=4.059)
- 72) M. Sgobba, G. Degliesposti, A. M. Ferrari, **G. Rastelli***. Structural models and binding site prediction of the C-terminal domain of human Hsp90: a new target for anticancer drugs. *Chem. Biol. Drug Des.* 2008, 71, 420-433. (IF=2.527)
- 73) T. Rossi, A. Coppi, E. Bruni, M. Sgobba, G. Degliesposti, **G. Rastelli***. In vitro effects of *Plasmodium falciparum* Dihydrofolate reductase inhibitors on normal and cancer cell proliferation. *ChemMedChem* **2008**, 3, 421-424. (IF=3.306)
- 74) A. M. Ferrari, G. Degliesposti, M. Sgobba, **G. Rastelli***. Validation of an automated procedure for the prediction of relative free energies of binding on a set of aldose reductase inhibitors. *Bioorg. Med. Chem.* **2007**, 15, 7865-7877. (IF=2.978)

- 75) N. Jacq, V. Breton, H.Y. Chen, L.Y. Ho, M. Hofmann, V. Kasam, H.C. Lee, Y. Legre', S.C. Lin, A. Maaß, E. Medernach, I. Merelli, L. Milanesi, **G. Rastelli**, M. Reichstadt, J. Salzemann. Virtual screening on large scale grids. *Parallel Comput.* 2007, **33**, 289-301. (IF=1.086)
- 76) N. Jacq, V. Breton, H-Y Chen, L-Y Ho, M. Hofmann, H-C Lee, Y. Legré, S.C. Lin, A. Maaß, E. Medernach, I. Merelli, L. Milanesi, **G. Rastelli**, M. Reichstadt, J. Salzemann, H. Schwichtenger, M. Sridhar, V. Kasam, Y-T Wu, M. Zimmermann. "Grid-enabled high throughput virtual screening". In "Distributed, High-Performance and Grid Computing in Computational Biology", bookseries "Lecture Notes in Computer Science". W. Dubitzky et al.(Eds.). Springer-Verlag Berlin Heidelberg. ISBN 978-3-540-69841-8, ISSN 03029743. **2007**, vol. 4360, pp. 45-59.
- 77) A. M. Ferrari, M. Sgobba, M.C. Gamberini, **G. Rastelli***. Relationship between quantum-chemical descriptors of proton dissociation and experimental acidity constants of variously hydroxylated coumarins. Identification of the biologically active species for xanthine oxidase inhibition. *Eur. J. Med. Chem.* 2007, **42**, 1028-1031. (IF=3.193)
- 78) **G. Rastelli**, Z. Q. Tian, Z. Wang, D. Myles, Y. Liu. Structure-based design of 7-carbamate analogs of geldanamycin. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2005, **15**, 5016-5021. (IF=2.661)
- 79) Z. Q. Tian, Y. Liu, D. Zhang, Z. Wang, S. D. Dong, C. W. Carreras, Y. Zhou, **G. Rastelli**, D. V. Santi, D. C. Myles. Synthesis and biological activities of novel 17-aminogeldanamycin derivatives. *Bioorg. Med. Chem.* 2004, **12**, 5317-5329. (IF=2.978)
- 80) M. D. Parenti, S. Pacchioni, A. M. Ferrari, **G. Rastelli***. Three-dimensional quantitative structure-activity relationship analysis of a set of *Plasmodium falciparum* dihydrofolate reductase inhibitors using a pharmacophore generation approach. *J. Med. Chem.* 2004, **47**, 4258-4267. (IF=5.207)
- 81) **G. Rastelli***, S. Pacchioni, M.D. Parenti. Structure of *Plasmodium vivax* dihydrofolate reductase determined by homology modeling and molecular dynamics refinement. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2003, **13**, 3257-3260. (IF=2.978)
- 82) S. Ghelli, M. Rinaldi, D. Barlocco, A. Gelain, P. Pecorari, D. Tondi, **G. Rastelli**, M.P. Costi. Ortho-halogen naphthaleins as specific inhibitors of lactobacillus casei thymidylate synthase. Conformational properties and biological activity. *Bioorg. Med. Chem.* 2003, **11**, 951-963. (IF=2.978)
- 83) **G. Rastelli***, S. Pacchioni, W. Sirawaraporn, R. Sirawaraporn, M.D. Parenti, A.M. Ferrari. Docking and database screening reveal new classes of *Plasmodium falciparum* Dihydrofolate Reductase inhibitors. *J. Med. Chem.* 2003, **46**, 2834-2845. (IF=5.207)
- 84) J.M. Jez, J.C.H. Chen, **G. Rastelli**, R.M. Stroud, D.V. Santi. Crystal structure and molecular modeling of 17-DMAG in complex with human Hsp90. *Chem. Biol.* 2003, **10**, 361-368. (IF=5.838)
- 85) L. Costantino, A.M. Ferrari, M.C. Gamberini, **G. Rastelli**. Nitrophenyl derivatives as Aldose Reductase inhibitors. *Bioorg. Med. Chem.* 2002, **10**, 3923-3931. (IF=2.978)
- 86) I. Cecconi, A. Scaloni, **G. Rastelli**, M. Moroni, P.G. Vilardo, L. Costantino, M. Cappiello, D. Garland, D. Carper, J.M. Petrash, A. Del Corso, U. Mura. Oxidative modification of Aldose Reductase induced by copper ion. Definition of the metal-protein interaction mechanism. *J. Biol. Chem.* 2002, **277**, 42017-42027. (IF=5.328)
- 87) W. Sirawaraporn, R. Sirawaraporn, S. Yongkiettrakul, A. Amornpol, **G. Rastelli**, S. Kamchonwongpaisan, Y. Yuthavong. Mutational analysis of *Plasmodium falciparum* dihydrofolate reductase: the role of aspartate 54 and phenylalanine 223 on catalytic activity and antifolate binding. *Mol. Biochem. Parasitol.* 2002, **121**, 185-193. (IF=2.875)
- 88) **G. Rastelli***, A.M. Ferrari, L. Costantino, M. C. Gamberini. Discovery of new inhibitors of aldose reductase from molecular docking and database screening. *Bioorg. Med. Chem.* 2002, **10**, 1437-1450. (IF=2.978)

- 89) **G. Rastelli***, L. Costantino, M. C. Gamberini, A. Del Corso, U. Mura, J.M. Petrash, A.M. Ferrari, S. Pacchioni. Binding of 1-benzopyran-4-one derivatives to aldose reductase: a free energy perturbation study. *Bioorg. Med. Chem.* 2002, **10**, 1427-1436. (IF=2.978)
- 90) G.A. Pinna, M.A. Pirisi, G.E. Grella, L. Gherardini, J.M. Mussinu, G. Paglietti, A.M. Ferrari, **G. Rastelli**. Synthesis and cytotoxicity of bis(benzo[g]indole-3-carboxamides) and related compounds. *Archiv der Pharmazie*, 2001, **334**, 337-344. (IF=1.529)
- 91) L. Costantino, A. Del Corso, **G. Rastelli**, J. M. Petrash, U. Mura. 7-Hydroxy-2-substituted-4-H-1-benzopyran-4-one derivatives as aldose reductase inhibitors: a SAR study. *Eur. J. Med. Chem.*, 2001, **36**, 697-703. (IF=3.193)
- 92) D. Rakowitz, G. Heinisch, P. Lukavsky, S. Kiendler, C. Trenkwalder, D. Barlocco, **G. Rastelli**, L. Costantino. A series of diarylsubstituted oximes as potential substrates for new aldose reductase inhibitors. *J. Heterocyclic Chem.*, 2000, **37**, 1089-1096. (IF=0.962)
- 93) A. Del Corso, L. Costantino, **G. Rastelli**, F. Buono, U. Mura. Aldose reductase does catalyse the reduction of glyceraldehyde through a stoichiometric oxidation of NADPH. *Exp. Eye Res.*, 2000, **71**, 515-521. (IF=2.817)
- 94) L. Costantino, **G. Rastelli**, G. Cignarella, D. Barlocco. Synthesis and aldose reductase inhibitory activity of a new series of benzo[h]cinnolinone derivatives. *Farmaco*, 2000, **55**, 544-552. (IF=0.565)
- 95) **G. Rastelli**, L. Antolini, S. Benvenuti, L. Costantino. Structural bases for the inhibition of aldose reductase by phenolic compounds. *Bioorg. Med. Chem.* 2000, **8**, 1151-1158. (IF=2.978)
- 96) L. Costantino, **G. Rastelli**, M. Cristina Gamberini, D. Barlocco. Pharmacological approaches to the treatment of diabetic complications. *Expert Opin. Ther. Pat.* 2000, **10**, 1245-1262. (IF=2.412)
- 97) **G. Rastelli**, W. Sirawaraporn, P. Sompornpisut, T. Vilaivan, S. Kamchonwongpaisan, R. Quarrel, G. Lowe, Y. Thebtaranonth, Y. Yuthavong. Interaction of pyrimethamine, cycloguanil, WR99210 and their analogues with *Plasmodium falciparum* Dihydrofolate reductase: Structural basis of antifolate resistance. *Bioorg. Med. Chem.* 2000, **8**, 1117-1128. (IF=2.978)
- 98) G.A. Pinna, M.M. Curzu, G. Murineddu, G. Chelucci, G. Cignarella, E. Menta, H.W. Krell, **G. Rastelli**, A.M. Ferrari. Preparation of Thieno[3,2-h]cinnolinones as matrix metalloprotease inhibitors. *Archiv der Pharmazie* 2000, **333**, 37-47. (IF=1.529)
- 99) L. Costantino, **G. Rastelli**, M.C. Gamberini, M.P. Giovannoni, V. Dal Piaz, P. Vianello, D. Barlocco. Isoxazolo-[3,4-d]-pyridazin-7-(6H)-one as a potential substrate for new aldose reductase inhibitors. *J. Med. Chem.* 1999, **42**, 1894-1900. (IF=5.207)
- 100) L. Costantino, **G. Rastelli**, M.C. Gamberini, J.A. Vinson, P. Bose, A. Iannone, M. Staffieri, L. Antolini, A. Del Corso, U. Mura, A. Albasini. 1-benzopyran-4-one antioxidants as aldose reductase inhibitors. *J. Med. Chem.* 1999, **42**, 1881-1893. (IF=5.207)
- 101) L. Costantino, **G. Rastelli**, P. Vianello, G. Cignarella, D. Barlocco. Diabetes complications and their potential prevention: Aldose reductase inhibition and other approaches. *Med. Res. Rev.* 1999, **19**, 3-23. (IF=10.228)
- 102) I. Cecconi, M. Moroni, P.G. Vilardo, M. Dal Monte, P. Borella, **G. Rastelli**, L. Costantino, D. Garland, D. Carper, J.M. Petrash, A. Dal Corso, U. Mura. Oxidative modification of Aldose reductase induced by copper ion. Factors and conditions affecting the process. *Biochemistry* 1998, **37**, 14167-14174. (IF=3.226)
- 103) M. Plessi, D. Bertelli, **G. Rastelli**, A. Albasini, A. Monzani. Fruits of ribes, rubus, vaccinium and prunus genus. Metal contents and genome. *Fresenius J. Anal. Chem.* 1998, **361**, 353-354. (IF=1.418)
- 104) **G. Rastelli***, L. Costantino, P. Vianello, D. Barlocco. Free energy perturbation studies on binding of the inhibitor 5,6-dihydrobenzo [h]cinnolin-3(2H)one-2-acetic acid and its methoxylated analogs to aldose reductase. *Tetrahedron* 1998, **54**, 9415-9428. (IF=3.011)

- 105) **G. Rastelli***, L. Costantino. Molecular dynamics simulations of the structure of aldose reductase complexed with the inhibitor tolrestat. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 1998, **8**, 641-646. (IF=2.661)
- 106) L. Costantino, **G. Rastelli**, G. Cignarella, P. Vianello, D. Barlocco. New aldose reductase inhibitors as potential agents for the prevention of long-term diabetic complications. *Expert Opin. Ther. Pat.* 1997, **7**, 843-858. (IF=2.412)
- 107) **G. Rastelli***, L. Costantino, A. Albasini. A model of the interaction of substrates and inhibitors with xanthine oxidase. *J. Am. Chem. Soc.* 1997, **119**, 3007-3016. (IF=9.023)
- 108) **G. Rastelli***, P. Vianello, D. Barlocco, G. Cignarella, L. Costantino, A. Del Corso, U. Mura. Structure-based design of an inhibitor modeled at the substrate active site of aldose reductase. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 1997, **7**, 1897-1902. (IF=2.661)
- 109) S. Ghelli, M.P. Costi, D. Barlocco, M. Rinaldi, D. Tondi, P. Pecorari, **G. Rastelli**. ¹H-NMR conformational studies of some phtalein derivatives acting as thymidylate synthase inhibitors. *Bollettino Chimico Farmaceutico*, 1997, **136**, 330-333.
- 110) L. Costantino, **G. Rastelli**, K. Vescovini, G. Cignarella, P. Vianello, A. Del Corso, M. Cappiello, U. Mura, D. Barlocco. Synthesis, activity and molecular modelling of a new series of tricyclic pyridazinones as selective aldose reductase inhibitors. *J. Med. Chem.* 1996, **39**, 4396-4405. (IF=5.207)
- 111) S. Ghelli, **G. Rastelli**, D. Barlocco, M. Rinaldi, D. Tondi, P. Pecorari, M.P. Costi. Conformational analysis of phtalein derivatives acting as thymidylate synthase inhibitors by means of ¹H-NMR and quantum chemical calculations. *Bioorg. Med. Chem.* 1996, **4**, 1783-1794. (IF=2.978)
- 112) L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Albasini. Natural polyhydroxylated compounds as inhibitors of xanthine oxidase. *Die Pharmazie*, 1996, **51**, 994-995. (IF=0.869)
- 113) L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Albasini. A rational approach to the design of flavones as xanthine oxidase inhibitors. *Eur. J. Med. Chem.* 1996, **31**, 693-699. (IF=3.193)
- 114) M.P. Costi, **G. Rastelli**, M. Rinaldi, M. Cevolani, P. Pecorari. Model chemical studies of thymidylate synthase. Nucleophilic addition of hydroxylamine to uracil and 5-fluorouracil. *Farmaco*, 1996, **51**, 209-214. (IF=0.565)
- 115) **G. Rastelli**, B. Thomas, P.A. Kollman, D.V. Santi. Insight into the specificity of Thymidylate synthase from molecular dynamics and free-energy perturbation calculations. *J. Am. Chem. Soc.* 1995, **117**, 7213-7227. (IF=9.023)
- 116) **G. Rastelli***, M.P. Costi. Theoretical analysis of the addition of hydroxylamine to uracil and 5-fluorouracil as a model for the Thymidylate synthase reaction. *J. Mol. Struct. (Theochem)* 1995, **343**, 1-9. (IF=1.599)
- 117) L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Albasini. Anthocyanidins as inhibitors of xanthine oxidase. *Die Pharmazie*, 1995, **50**, 573-574. (IF=0.869)
- 118) **G. Rastelli***, L. Costantino, A. Albasini. Theoretical and Experimental Study of Flavones as Inhibitors of Xanthine Oxidase. *Eur. J. Med. Chem.* 1995, **30**, 141-146. (IF=3.193)
- 119) L. Costantino, **G. Rastelli**, M.C. Rossi, A. Albasini. Quantitative Measurement of Proton Dissociation and Tautomeric Constants of Apigeninidin. *J. Chem. Soc., Perkin Transact. 2*, 1995, **2**, 227-234. (IF=1.77)
- 120) **G. Rastelli***, L. Costantino, A. Albasini. Solvent Effects on the Tautomerism of Apigeninidin. *Tetrahedron Lett.* 1994, **35**, 9751-9754. (IF=2.618)
- 121) L. Costantino, **G. Rastelli**, T. Rossi, M. Bertoldi, A. Albasini. Composition, Superoxide Radicals Scavenging and Antilipoperoxidant Activity of some Edible Fruits. *Fitoterapia* 1994, Volume LXL, n°1, 44-47. (IF=1.899)
- 122) L. Costantino, **G. Rastelli**, T. Rossi, M. Bertoldi, A. Albasini. Activit  Antilipoperoxidante d'Extraits Polyphenoliques de *Ribes Nigrum L.* *Plantes M dicinales et Phytoth rapie*, 1993, Tome XXVI, n°3, 207-214.

- 123) G. Vampa, L. Antolini, **G. Rastelli**, M.P. Costi, M. Rinaldi, P. Pecorari. Crystal and Molecular Structures of 5-fluoro-3-methyl-5-chloro-3-methyl- and 5-chloro 1,3-dimethyl-uracil. Hydrogen-bond Patterns through X-Ray and Molecular Orbital Analysis. *J. Chem. Res. (S)* 1993, 6, 212-213; (M) 1993, 1346-1379. (IF=0.550)
- 124) **G. Rastelli***, L. Costantino, A. Albasini. Physico-chemical Properties of Anthocyanidins. Part 1. Theoretical Evaluation of the Stability of the Neutral and Anionic Tautomeric Forms. *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 1993, **279**, 157-166. (IF=1.599)
- 125) L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Albasini. Inhibitory Activity of Flavonols Toward the Xanthine Oxidase Enzyme. *Int. J. Pharmaceut.* 1992, **86**, 17-23. (IF=3.607)
- 126) L. Costantino, A. Albasini, **G. Rastelli**, S. Benvenuti. Activity of Polyphenolic Crude Extracts as Scavengers of Superoxide Radicals and Inhibitors of Xanthine Oxidase. *Planta Med.* 1992, **58**, 342-344. (IF=2.369)
- 127) L. Costantino, G. Rastelli, T. Rossi, M. Bertoldi, A. Albasini. Antilipoperoxidant activity of polyphenolic crude extracts of some edible fruits. *Planta Med.* 1992, **58(7)** A662-A663. (IF=2.369)
- 128) **G. Rastelli**, F. Fanelli, M.C. Menziani, M. Cocchi, P.G. De Benedetti. Conformational Analysis, Molecular Modelling and Quantitative Structure-Activity Studies of 2,4-diamino-6,7-dimethoxy-2-substituted quinazoline α 1-Adrenergic Antagonists. *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 1991, **251**, 307-318. (IF=1.599)
- 129) P.G. De Benedetti, M.C. Menziani, **G. Rastelli**, M. Cocchi. Molecular Orbital Study of the Nitrogen Basicity of Prazosin Analogues in Relation to their α 1-Adrenoceptor Binding Affinity *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 1991, **233**, 343-351. (IF=1.599)
- 130) M. Cocchi, M.C. Menziani, **G. Rastelli**, P.G. De Benedetti. QSAR Analysis in 2,4-Diamino,6,7-dimethoxy Quinoline Derivatives Quinoline Derivatives - α 1-Adrenoceptor Antagonists – Using the Partial Least Squares (PLS) Method and Theoretical Molecular Descriptors. *Quantitative Structure-Activity Relationships* 1990, **9**, 340-345. (IF=1.397)

20. Book reviews

- 1) "Fragment-Based Drug Discovery: a Practical Approach", edited by Edward R. Zartler and Michael J. Shapiro. 2008 John Wiley & Sons, Ltd. *ChemMedChem* 2009, 4, 1756-1757. (IF=3.15) DOI: 10.1002/cmcd.200900251.

21. Articoli Divulgativi

- 1) "Riposizionamento di farmaci e prodotti naturali: Verso nuove strategie terapeutiche" S. Benvenuti, G. Cannazza, M.C. Gamberini, F. Pellati, L. Pinzi, **G. Rastelli*** Symbols N°5 Luglio/Agosto 2020, pag 16-17
- 2) **G. Rastelli***, L. Pinzi, F. Pellati, M. C. Gamberini. "Repositioning Natural Products In Drug Discovery Meeting". *La Chimica e l'Industria* - ISSN 2532-182X - 2020, 7(2), febbraio/marzo.
- 3) A. Anighoro, D. Stumpfe, K. Heikamp, J. Bajorath, **G. Rastelli***. Targeting the Hsp90 interactome using in silico polypharmacology approaches. *La Chimica & L'Industria* 2013, 4, 105-106.
- 4) **G. Rastelli***, G. Degliesposti, M. Parenti, C. Portioli. BEAR: una piattaforma di screening virtuale al servizio delle aziende farmaceutiche e biotecnologiche. *La Chimica & L'Industria* 2010, 10, 124-125.
- 5) **G. Rastelli***, G. Degliesposti, M.D. Parenti, C. Portioli. Una piattaforma di screening virtuale al servizio delle aziende farmaceutiche e biotecnologiche. *LAB-Il mondo del laboratorio* 2010, 7, 120-121.
- 6) **G. Rastelli***. Disegnare i farmaci al computer. *Linx Magazine* 2009, 4, 14-19.

In fede,

Giulio Rastelli

A handwritten signature in blue ink that reads "Giulio Rastelli," with a comma at the end. The signature is written in a cursive style.