



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'anidrasì 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 MMDDL (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:

- Jun 2024-present: Responsabile del curriculum "Health Products" della scuola di dottorato

HipTech (Health Innovation Products and Technologies).

- Oct 2023-presente: membro del Comitato di Indirizzo del corso di laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.
- Mar 2022-presente: membro della Commissione Ricerca del Dipartimento di Scienze della Vita, UNIMORE.
- Nov 2021: membro della Commissione di una procedura valutativa per professore associato Art 24 comma 5, legge 240/2020 indetta dall'Università di Genova per il SSD CHIM/08
- 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 delle 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:

- Associate Member della rivista *Frontiers in Chemistry* (ISSN 2296-2646) per la sezione "Medicinal and Pharmaceutical Chemistry". May 2022 - presente
- Membro ad invito nella 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
- Cover page della rivista Bioorganic & Medicinal Chemistry per la pubblicazione "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.
- Cover page della rivista Chem Biol Drug Des per la pubblicazione "Activity prediction and structural insights of Extracellular Signal-Regulated Kinase 2 inhibitors with molecular dynamics simulations", *Chem Biol Drug Des* 2009, 74, 630-635.
- 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.
- Plos ONE Reviewer 2015 acknowledgment: Citation: (2016) PLOS ONE 2015 Reviewer Thank You. PLoS ONE 11(2): e0150341. doi:10.1371/journal.pone.0150341
- 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.
- Cover page della rivista Journal of Chemical Information and Modeling per la pubblicazione “Exploring the binding site of C-terminal Hsp90 inhibitors”, J Chem Inf Model 2010, 50, 1522-1528.
- Certificato di apprezzamento ricevuto da “ACS Publications” per le attività di reviewer di manoscritti sottomessi alle riviste dell’American Chemical Society (2011).
- Certificati di riconoscimento ricevuti da “ACS Publications” per le attività di reviewer di manoscritti sottomessi alle riviste dell’American Chemical Society (2015, 2016, 2018).
- Certificati di “Outstanding Reviewer” negli anni 2013, 2015, 2016 per la rivista Journal of Medicinal Chemistry (ACS).
- 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”.
- Selezionato in qualità di 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. Articolo su La Gazzetta di Modena del 19 Dicembre 2014.
- 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. Articolo su Il Resto del Carlino del 19 Dicembre 2014.
- Articolo sulla Gazzetta di Modena del 30/12/2013 riportante la notizia che il gruppo del Prof Rastelli è capofila di un progetto di ricerca sul cancro finanziato dalla Fondazione Nando Peretti.
- Articolo 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’anidrasa 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’anidrasa 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 AIRC.
- VQR 2004-2010, pubblicazione “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, classificata come “Eccellente”.
- VQR 2004-2010, pubblicazione “Synthesis and biological activities of novel 17-aminogeldanamycin derivatives” *Bioorg. Med. Chem.* 2004, 12, 5317-5329, classificata come “Eccellente”.
- VQR 2011-2014, pubblicazione “Structure-based design of potent aromatase inhibitors by High-Throughput docking”, *J. Med. Chem.* 2011, 54, 4006-4017, classificata come “Eccellente”.
- VQR 2011-2014, pubblicazione “Polypharmacology: challenges and opportunities in drug discovery”, *J. Med. Chem.* 2014, 57, 7874-7887, classificata come “Eccellente”.
- Partecipazione ad invito all’”Award committee for the TuYouyou Award 2020” ricevuta dalla rivista *Molecules* il 19 Novembre 2020
- Highlight dell’articolo “Synthesis of potent and selective HDAC6 inhibitors led to unexpected opening of quinazoline ring, RSC Adv. 2022, 12, 11548-11556” su Synfacts 2022, 18(07), 0800 Published online: 15.06.2022. DOI: 10.1055/s-0041-1737642
- “Premio Cortesi” per il progetto “Valutazione dell’attività antiproliferativa di inibitori duali di Hsp90 e HDAC6 su cellule di tumore prostatico e colonrettale”, conferito in occasione dell’inaugurazione dell’848° A.A. dell’Università di Modena e Reggio Emilia. Mantova, 12 Marzo 2024.
- TopScholar nomination in the ScholarGPS research ranking list (#87 in drug discovery, #119 in drug design, #285 in medicinal chemistry), July 2024.

6. **Indici bibliometrici:**

ResearcherID: D-2224-2015
 ORCID ID: 0000-0002-2474-0607
 Scopus Author ID: 56962710600

Indici bibliometrici (Luglio 2024): H-index=39, #citazioni totali >7000, (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 Plasmepsin 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.*
- FISIR (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*. 423.000 euro.
- 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*. 80.000 euro
- 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
- Cofin per PON x RTDa 2021 vincitore Dott. Luca Pinzi, Prof Giulio Rastelli
- European Union - NextGenerationEU through the Italian Ministry of University and Research under PNRR - M4C2-I1.3 Project PE_00000019 “Health Extended ALliance for Innovative Therapies, Advanced Lab-research, and Integrated Approaches of Precision Medicine” (HEAL ITALIA) *Ruolo: Partecipante*.
- Fondo di Ateneo per la Ricerca (FAR 2023, DR1298/2023) per il finanziamento di progetti di ricerca interdisciplinari, Linea UNIMORE. Progetto “Lead Optimization strategy for the identification of a drug candidate against metastatic castrate-resistant prostate cancer”. 2 Nov 2023 – 1 Lug 2025. *Ruolo: Coordinatore del progetto*.
- Finanziamento PRIN 2022 Progetto LODI “Lead Optimization of HDAC6/Hsp90 Dual Inhibitors: identification of a drug candidate against metastatic castrate-resistant prostate cancer”. Project ID: 2022S5NWF8. *Ruolo: Coordinatore del progetto*.

10. **Finanziamenti competitivi per progetti di calcolo scientifico**

- IS CRA (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.
- IS CRA (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.
- IS CRA (Italian Super Computing Resource Allocation), Progetto AntiCBX7, 2015, Project HP10C68GKI. Class C project, 75k CPU hours on GALILEO.

11. 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 proveniente 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.
- Organizzatore e chairman del DDE meeting ("Drug Discovery in Epigenetics"). Modena 15 Dicembre 2023. Il sito web del meeting è disponibile all'indirizzo <http://www.mmddlab.unimore.it/site/home/dde-workshop.html>.

12. 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 che 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 farmaco-resistenti delle Dihydrofolato reduttasi 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 sono state oggetto di 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 αC 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 Broggin (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, in corso di realizzazione ma già disponibile all'indirizzo www.mmddlab.unimore.it/site/home/ligadvisor.html, 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. I partecipanti al team includono Silvia Franchini e Claudia Sorbi per la sintesi chimica, Carol Imbriano e Lucia Altucci per la sperimentazione biologica e farmacologica. 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".

- **Coordinazione del progetto 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" (2021-2024)**

Il progetto, finanziato dalla Regione Emilia Romagna, verte sull'utilizzo di tecniche di intelligenza artificiale e analisi di big data ai fini dell'identificazione di candidati farmaci contro il tumore alla prostata metastatico resistente, attraverso operazioni di "riposizionamento" di farmaci approvati e in sperimentazione clinica.

13. 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 Plasmeptina 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 Plasmeprin 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 è 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.

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

- 1) **Seminario ad invito: G. Rastelli.** "Disegnare i farmaci al computer". Università di Napoli. Seminario AIRCampus. Napoli, May 16, 2024.
- 2) **Seminario ad invito: G. Rastelli.** "Disegnare i farmaci al computer". Università di Napoli. Seminario AIRCampus. Napoli, November 29, 2022.
- 3) **Seminario ad invito: G. Rastelli.** "Refinement and rescoring of docking and virtual screening results". Advanced School in Drug Research and Development. Parma, September 4-8 2022. Oral communication
- 4) **Seminario ad invito: G. Rastelli.** "Binding estimation After Refinement (BEAR): A post-docking tool for drug design." MuTaLig COST ACTION CA15135, Annual meeting 2018. La Valletta (Malta), October 18-19 2018. Comunicazione orale.
- 5) **Seminario ad invito: G. Rastelli,** "Polypharmacology", BIGCHEM First Autumn School: Introduction to Chemoinformatics. Monaco 17-21 Ottobre 2016. Scuola per dottorandi Marie Curie H2020-MSCA-ITN-EID del progetto BIGCHEM (Big Data in Chemistry), Project Id. 676434 di cui UNIMORE è partner.
- 6) **Conferenza Plenaria ad invito: G. Rastelli,** "Polypharmacology, an emerging approach in drug discovery". 7^e Journées de la Société Française de Chémoinformatique, Nice (France) 8-9 October 2015, CP4, pagina 12
- 7) **Seminario ad invito: G. Rastelli.** La polifarmacologia: un approccio emergente nel drug discovery. Italfarmaco, Milano 18 Febbraio 2015.
- 8) **Seminario ad invito: G. Rastelli.** La polifarmacologia: un approccio emergente nel drug discovery. Università degli Studi Magna Græcia, Catanzaro 26 Novembre 2013.
- 9) **Conferenza ad invito: G. Rastelli,** "BEAR, an innovative tool for virtual screening" sul tema "Drug Design: Case study I". Workshop "HPC for Proteomics" and RNBIO Advanced Training Course "Bioinformatics for Proteomics", CINECA, Casalecchio di Bologna, 12-14 December 2011.
- 10) **Conferenza ad invito: G. Rastelli,** "Development And Application Of Structure-Based Design Methods In Drug Discovery". Computationally Driven Drug Discovery (CDDD) Meeting. Dompé, L'Aquila, 21-23 November 2011.

- 11) **Conferenza ad invito: G. Rastelli.** “Validation of free energy-based scoring functions in virtual screening. “VIII EWDD, Eight European Workshop in Drug Design”, Certosa di Pontignano, Siena (Italy) 22-28 May 2011.
- 12) **Seminario ad invito: G. Rastelli.** BEAR, una nuova metodologia per lo screening virtuale. SigmaTau, Pomezia (RM) 21 Ottobre 2010.
- 13) **Conferenza ad invito: G. Rastelli.** BEAR as a new tool for drug discovery: applications to WISDOM. “GRID Open Days on New Frontiers in Drug Discovery: Models & Grid Computing”. Catania 22-23 Gennaio 2009.
- 14) **Conferenza ad invito: G. Rastelli, G. Degliesposti.** Molecular dynamics in WISDOM, comunicazione orale al BioinfoGRID Symposium 2007. Milano 10-13 Dicembre 2007.
- 15) **Conferenza ad invito: G. Rastelli.** “Automated molecular dynamics workflow for virtual screening”, all’interno del “Workshop on WISDOM”, HealthGrid 2007 Conference. Ginevra 24-27 Aprile 2007.
- 16) **Seminario ad invito: G. Rastelli.** “New approaches for virtual screening”. Nerviano Medical Sciences. Milano 16 Ottobre 2007.
- 17) **Conferenza ad invito: G. Rastelli.** “Gli studi di progettazione del farmaco”. Conferenza su invito all’interno del Master in “Gestione delle sperimentazioni”, organizzato dal Dott. Vittorio Silingardi dell’Azienda Ospedaliero-Universitaria di Modena. Modena 2 Marzo 2007.
- 18) **Seminario ad invito: G. Rastelli.** “AMBER overview”, Dipartimento di Biologia dell’Università Roma3. Roma, 3 Novembre 2006.
- 19) **Conferenza ad invito: G. Rastelli.** Structure-based design of novel antimalarials. Workshop on “Medicinal Chemistry in Parasitology”, Modena 23 Gennaio 2004. Atti pag 17.
- 20) **Conferenza ad invito: G. Rastelli** “Da idea a farmaco: il percorso virtuale”, tenuta a Modena il 26 Novembre 1999 all’interno del “Corso di Scienze del Farmaco” organizzato dall’Associazione Cultura e Vita.

15. *Comunicazioni orali a congressi nazionali e internazionali, scuole*

- 21) A. Citarella, S. Belluti, D. Bonanni, D. Moi, L. Pinzi, L. Cuoghi, S. Di Ciolo, A. Silvani, S. Franchini, D. Passarella, C. Imbriano, C. Sorbi, C. Giannini, **G. Rastelli.** Targeting Aggressive Prostate Cancer Through HDAC6/HSP90 Dual Inhibitors Based on a 2-Amino-Pyrrolopyrimidine Scaffold. The 4th Molecules Medicinal Chemistry Symposium (MMCS 2024 Conference), 24-26 April 2024, Barcelona, Spain. Oral communication, pag. 66
- 22) **L. Pinzi, L., A. Citarella, S. Belluti, D. Bonanni, D. Moi, L. Cuoghi, S. Di Ciolo, A. Silvani, S. Franchini, D. Passarella, C. Imbriano, S. Sorbi, C. Giannini, G. Rastelli.** Design, synthesis and in vitro evaluation of Hsp90/HDAC6 dual inhibitors based on a 2-amino-pyrrolopyrimidine scaffold for the targeting of aggressive prostate cancer. XXVIII National Meeting in Medicinal Chemistry, Chieti 17-20 Settembre 2023, oral communication OC16, pag 51.
- 23) **A. Citarella, D. Moi, D. Bonanni, L. Pinzi, D. Passarella, A. Silvani, C. Giannini, G. Rastelli** Aminotriazoloquinazoline- and aminotriazolo-based hydroxamic acids are novel potent and selective HDAC6 inhibitors with subnanomolar activity. XL Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Organica, CDCO Palermo 11-15 September 2022. OC-88, oral communication.
- 24) **A. Tinivella, G. Rastelli.** “Data-driven technologies for drug repurposing: use of machine-learning models to predict the selectivity profile of known molecules”. PhD Day 2021, Doctorate School in Clinical and Experimental Medicine. Modena 6 Giugno 2021, comunicazione orale.
- 25) **L. Pinzi, A. Tinivella, G. Rastelli.** “LigAdvisor: a web server to perform in silico explorations on crystallographic ligands and known drugs for polypharmacology and drug repurposing”. SCI2021 - XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana” Società Chimica Italiana. Conferenza in modalità virtuale. 17 settembre 2021.

- 26) **L. Pinzi**, A. Tinivella, G. Rastelli. "Development and application of LigAdvisor, a user-friendly web-platform for polypharmacology and drug repurposing". "7th CDDD Meeting COMPUTATIONALLY DRIVEN DRUG DISCOVERY Virtual Meeting" Università degli Studi di Milano in collaborazione con la Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana. Meeting in modalità virtuale. 25 giugno 2021
- 27) **A. Tinivella**, L. Pinzi, G. Rastelli. "LigAdvisor: a unified and easily accessible webserver for polypharmacology and drug repurposing". Paul Ehrlich (PE) Euro-PhD Network virtual meeting 26-28 Luglio 2021, comunicazione orale.
- 28) **A. Tinivella**, A.L. Benatti, L. Pinzi, G. Rastelli. "An integrated in silico drug repurposing workflow to identify novel potent carbonic anhydrase inhibitors". XIX Giornata della Chimica dell'Emilia Romagna. Dipartimento di Scienze della Vita, Modena 6 Dicembre 2019. Comunicazione orale F8. **Premio ex-equo per la migliore comunicazione flash** tra gli studenti dei corsi di Dottorato nell'ambito delle Scienze Chimiche dell'Università dell'Emilia Romagna.
- 29) **G. Rastelli**. "Riposizionamento di farmaci in nuove aree terapeutiche". Conferenza di Ateneo dal titolo "Potenzialità e innovazione nella ricerca biomedica: approcci interdisciplinari" II edizione, Modena 26 Settembre 2019. Comunicazione orale.
- 30) **L. Pinzi**, G. Rastelli. "Unveiling target associations for polypharmacology from analysis of crystallographic ligands in the Protein Data Bank". XXVI National Meeting in Medicinal Chemistry, Milano 16-19 Luglio 2019. Comunicazione orale
- 31) **A. Tinivella**, A.L. Benatti, L. Pinzi, G. Rastelli. "In silico repurposing of the hexahydrocyclopenta[c]quinoline scaffold as potent Carbonic Anhydrase inhibitors". Paul Ehrlich Euro-PhD Network & MuTaLig COST Action meeting 2019, Catanzaro (Italy), June 13th-15th 2019. Comunicazione orale CA-SC16.
- 32) **L. Pinzi**, G. Rastelli, "Predicting drug polypharmacology using structural databases". XVI Giornata della Chimica dell'Emilia Romagna, Ferrara 19 Dicembre 2016. Comunicazione orale O3, pag 16.
- 33) **G. Rastelli**, "Structure-based polypharmacology in drug design". XXIV National Meeting in Medicinal Chemistry, Perugia 11-14 Settembre 2016. Comunicazione orale.
- 34) **L. Pinzi**, G. Rastelli. "Rational design of dual inhibitors of Hsp90 and BRAF as a novel pharmacological approach against melanomas". 5th Meeting of the Paul Ehrlich MedChem Euro-PhD Network, Krakow (Poland), 3-5 July 2015. O-20, page 42. Comunicazione orale.
- 35) **A. Anighoro**, D. Stumpfe, K. Heikamp, J. Bajorath, G. Rastelli, "A computational polypharmacology protocol within the Hsp90 interactome". 3rd Meeting of the Paul Ehrlich MedChem Euro-PhD Network, Santa Margherita di Pula, Cagliari, 27-29 September 2013. Comunicazione orale.
- 36) **G. Rastelli**, A. Anighoro, M. Chripkova, L. Carrassa, M. Brogginì. "Structure-based discovery of the first allosteric inhibitors of Cyclin-dependent kinase 2". XII National Meeting on Medicinal Chemistry, Roma 10-13 September, 2013. Comunicazione orale S10.
- 37) **A. Anighoro**, Dagmar Stumpfe, Jürgen Bajorath, G. Rastelli, "Targeting the Hsp90 interactome using in silico polypharmacology approaches". Computationally Driven Drug Discovery (CDDD) Meeting. Istituto Italiano di Tecnologia, Genova, 4-6 February 2013. Comunicazione orale.
- 38) **A. Anighoro**, D Stumpfe, J Bajorath, G Rastelli. "Targeting the Hsp90 interactome using in silico polypharmacology approaches". XII Giornata di Chimica dell'Emilia-Romagna, Ferrara 17 Dicembre 2012. Comunicazione orale FC7 pag. 13. Premio ex-aequo per la migliore comunicazione.
- 39) **A. Anighoro**, C. Portioli, M. Sgobba, G. Rastelli. "Validation of the performance of a post-docking method on multiple target structures". 1st Meeting of the Paul Ehrlich MedChem Euro-PhD Network, Madrid (Spain) 13-15 July 2011. Comunicazione orale O-6, Abstract page 38.
- 40) **G. Rastelli**. Enhancing success rates in virtual screening. "MedChem Europe", Munich (Germany) 28-29 March 2011. Oral communication

- 41) **M.D. Parenti**, G. Degliesposti, C. Portioli, G. Rastelli. Binding estimation after refinement: BEARing out an innovative virtual screening methodology. *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
- 42) **G. Rastelli**, G. Degliesposti, M.D. Parenti, C. Portioli. Improving enrichment and hit rates in virtual screening. "XX National Meeting on Medicinal Chemistry", Abano Terme (Padova, Italy) September 12-16, 2010. Comunicazione orale #SC22, page 80.
- 43) **G. Rastelli**, G. Degliesposti, M.D. Parenti, C. Portioli. Improving enrichment and hit rates in virtual screening. "MipTec 2010" Basel (Switzerland) September 20-24, 2010. Comunicazione orale #46, page 25.
- 44) **M. Sgobba**, G. Rastelli. Computational studies for the identification of the C-terminal binding site of Hsp90: towards the development of new anticancer drugs. VIII Giornata della Chimica dell'Emilia Romagna. Ferrara, 16 Dicembre 2008. Comunicazione orale Atti O7.
- 45) **G. Rastelli**, M. Sgobba, Degliesposti, A. Del Rio. Structure-based design of N- and C- terminal Hsp90 inhibitors: towards the development of new anticancer drugs. XIX National Meeting on Medicinal Chemistry, Verona 14-18 Settembre 2008, Comunicazione orale Atti SC-002 pag. 68.
- 46) **G. Degliesposti**, G. Rastelli. Molecular dynamics refinement and rescoring in WISDOM virtual screenings. Comunicazione orale al 3rd EGEE User Forum, Clermont-Ferrand, France. 11-14 Febbraio 2008. Comunicazione orale Atti pag 30.
- 47) **L. Costantino**, G. Rastelli, A.M. Ferrari, M.C. Gamberini. Progettazione e sintesi di nuovi inibitori dell'enzima Aldoso Reduttasi. XVI Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica, Società Chimica Italiana, Sorrento 18-22 Settembre 2002,. Comunicazione orale Atti L-32 pag. 66.
- 48) **G. Rastelli**, L. Costantino. Molecular modelling e structure-based design di inibitori lead dell'enzima aldoso reduttasi. XX Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Rimini 4-9 Giugno 2000, Comunicazione orale. Atti MO-OR006.
- 49) **G. Rastelli**, W. Sirawaraporn, D.V. Santi. Antifolate resistance in *Plasmodium falciparum* Dihydrofolate reductase: a structural rationale. XIV Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, Salsomaggiore Terme, Parma 21-25 Settembre 1998, Comunicazione orale. Atti pag.61.
- 50) **G. Rastelli**, P.G. Baraldi, M. Bergonzoni, P.A. Borea, K. Varani . Adenosine A2a receptor: molecular modelling of the interactions of agonists and antagonists. Fourth European Congress of Pharmaceutical Sciences, Milano 11-13 Settembre 1998. European Journal of Pharmaceutical Sciences, Vol. 6 Suppl. 1, Special Issue, Comunicazione orale n° 26, pag. S7
- 51) **G. Rastelli**, L. Costantino, A. Albasini. Studio degli Equilibri in Soluzione delle Antocianidine. 6° Convegno Nazionale della Società Italiana di Fitochimica, Fiuggi 21-23 Maggio 1992, Atti pagg. 15-18.

16. 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.

•

AA 2021-2022

- 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.

•

AA 2022-2023

- 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.

AA 2023-2024

- 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.

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.

17. *Elenco delle pubblicazioni*

- 1) L. Pinzi, C. Conze, N. Bisi, G. Dalla Torre, A. Soliman, N. Monteiro-Abreu, N. I. Trushina, A. Krusenbaum, M. Khodaei Dolouei, A. Hellwig, M. S. Christodoulou, D. Passarella, L. Bakota, **G. Rastelli***, **R. Brandt***. Quantitative live cell imaging of a tauopathy model enables the identification of a polypharmacological drug candidate that restores physiological microtubule interaction. *Nature Communications* 2024, 15, 1679. (IF=16.6)
- 2) N. Bisi, L. Pinzi, G. Rastelli, N. Tonali. Early Diagnosis of Neurodegenerative Diseases: What Has Been Undertaken to Promote the Transition from PET to Fluorescence Tracers. *Molecules* 2024, 29, 722. (IF=4.6)
- 3) A. Tinivella, M. Banchi, G. Gambacorta, F. Borghi, P. Orlandi, I.R. Baxendale, A. Di Paolo, G. Bocci, **L. Pinzi***, **G. Rastelli***. Discovery of a Potent Dual Inhibitor of Aromatase and Aldosterone Synthase. *ACS Pharmacol Transl. Sci.* 2023, 6, 1870-1883. (IF=6).
- 4) L. Pinzi, **G. Rastelli***. Trends and Applications in Computationally Driven Drug Repurposing *Int. J. Mol. Sci.* 2023, 24, 16511. (IF=5.6).
- 5) D. Moi, D. Bonanni, S. Belluti, P. Linciano, A. Citarella, S. Franchini, C. Sorbi, C. Imbriano, **L. Pinzi***, **G. Rastelli***. Discovery of potent pyrrolo-pyrimidine and purine HDAC inhibitors for the treatment of advanced prostate cancer. *Eur. J. Med. Chem.* 2023, 260, 115730. (IF=6.7).
- 6) L. Pinzi, N. Bisi, C. Sorbi, S. Franchini, N. Tonali, **G. Rastelli***. Insights into the Structural Conformations of the Tau Protein in Different Aggregation Status. *Molecules* 2023, 28, 4544. (IF=4.927)
- 7) L. Bernal, L. Pinzi, G. **Rastelli***. Identification of Promising Drug Candidates against Prostate Cancer through Computationally-Driven Drug Repurposing. *Int. J. Mol. Sci.* 2023, 24(4), 3135. (IF=6.208).
- 8) Design, synthesis, biological evaluation and crystal structure determination of dual modulators of carbonic anhydrases and estrogen receptors. A. Tinivella, J.C. Nwachukwu, A. Angeli, F. Foschi, A.L. Benatti, L. Pinzi, T. Izard, M. Ferraroni, R. Erumbi, M.S. Christodoulou, D. Passarella, C. Supuran, K.W. Nettles, **G. Rastelli***. *Eur. J. Med. Chem.* 2023, 246, 115011. (IF=7.088).
- 9) F. Foschi, A. Tinivella, V. Crippa, L. Pinzi, L. Mologni, D. Passarella, **G. Rastelli***. Structure-activity exploration of a small-molecule allosteric inhibitor of T790M/L858R double mutant EGFR. *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* 2023, 38, 239-245. (IF=5.756)
- 10) D. Bonanni, L. Pinzi, **G. Rastelli***. Development of machine learning classifiers to predict compound activity on prostate cancer cell lines. *J. Cheminform.* **2022**, 14:77. (IF=8.489)
- 11) **G. Rastelli***. Meet the Editorial Board member. *Curr. Med. Chem.* **2022**, 29, 2565. (IF=4.53)
- 12) D. Moi, A. Citarella, D. Bonanni, L. Pinzi, D. Passarella, A. Silvani, C. Giannini, **G. Rastelli***, Synthesis of potent and selective HDAC6 inhibitors led to unexpected opening of quinazoline ring, *RSC Adv.* 2022, 12, 11548-11556 (IF=3.361)
- 13) A. Tinivella, L. Pinzi, G. Gambacorta, I. Baxendale, **G. Rastelli***, Identification of potential biological targets of oxindole scaffolds via *in silico* repositioning strategies. *F1000Research* 2022, 11 (Chem Inf Sci), 217.
- 14) 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.* 2022, 29, 1474-1502. (IF=4.53)
- 15) 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)

- 16) 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)
- 17) 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, 10, 1177-1185. (IF=2.911)
- 18) 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. Enzyme Inhib. Med. Chem.* 2021, 36, 2080-2086. (IF=5.051)
- 19) 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)
- 20) 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)
- 21) 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)
- 22) 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)
- 23) 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)
- 24) 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)
- 25) 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)
- 26) 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).
- 27) **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).
- 28) 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)
- 29) 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* 2020, 25, 119; doi:10.3390/molecules25010119. (IF=3.267).
- 30) 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)
- 31) M.L. Di Paolo, M.S. Christodoulou, A.M. Calogero, L. Pinzi, **G. Rastelli**, D. Passarella, G. Cappelletti, L. Dalla Via. 2-Phenyloxazole-4-carboxamide as new scaffold for selective inhibition of human monoamine oxidase B. *ChemMedChem* 2019, 14, 1641-1652. (IF=3.016)

- 32) 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)
- 33) **G. Rastelli***, L. Pinzi. Refinement and rescoring of virtual screening results. *Front. Chem.* 2019, 7:498. (IF=3.782)
- 34) 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)
- 35) 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
- 36) 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).
- 37) 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)
- 38) 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)
- 39) 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)
- 40) 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)
- 41) 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).
- 42) 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)
- 43) 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).
- 44) 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).
- 45) **G. Rastelli**. Meet our Editorial Board member, Prof. Giulio Rastelli. *Curr. Med. Chem.* 2017, 24, 951. DOI:10.2174/092986732410170526175445
- 46) 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)
- 47) 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)
- 48) 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).
 - 49) 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).
 - 50) 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)
 - 51) 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)
 - 52) 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).
 - 53) 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)
 - 54) 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).
 - 55) 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)
 - 56) **G. Rastelli***, L. Pinzi. Computational polypharmacology comes of age. *Front. Pharmacol.* 2015, 6, 157. doi: 10.3389/fphar.2015.00157 (IF=3.802)
 - 57) 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. Leyssen, 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)
 - 58) 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).
 - 59) 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)
 - 60) C. Micelli, **G. Rastelli***. Histone deacetylases: structural determinants of inhibitor selectivity. *Drug Discov. Today* 2015, 20, 718-735. (IF=6.691)
 - 61) 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)
 - 62) A. Anighoro, J. Bajorath, **G. Rastelli***. Polypharmacology: Challenges and opportunities in drug discovery. *J. Med. Chem.* 2014, 57, 7874-7887. (IF=5.614)
 - 63) **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).

- 64) **G. Rastelli***. Dimerization hot spots in the structure of human Hsp90. *Med. Chem. Commun.*, 2014, 5, 797-801. (IF=2.722).
- 65) A. Anighoro, **G. Rastelli***. BEAR, a molecular docking refinement and rescoring method. *Comput. Mol. Biosci.* 2013, 3, 27-31.
- 66) 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)
- 67) **G. Rastelli***. Emerging topics in structure-based virtual screening. *Pharm. Res.* 2013, 30, 1458-1463. (IF=4.742).
- 68) 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)
- 69) 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)
- 70) 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)
- 71) 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)
- 72) 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)
- 73) 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)
- 74) 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)
- 75) 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)
- 76) **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)
- 77) 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)
- 78) M. Sgobba, **G. Rastelli***. Structure-based and in silico design of Hsp90 inhibitors. *ChemMedChem* 2009, 4, 1399-1409. (IF=3.306)
- 79) 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)
- 80) 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)
- 81) **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)
- 82) 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)

- 83) 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.
- 84) **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)
- 85) 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)
- 86) 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)
- 87) 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)
- 88) 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)
- 89) 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.
- 90) 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)
- 91) **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)
- 92) 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)
- 93) 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)
- 94) **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)
- 95) 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)
- 96) **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)
- 97) 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)

- 98) 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)
- 99) I. Cecconi, A. Scaloni, **G. Rastelli**, M. Moroni, P.G. Vilaro, 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)
- 100) 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)
- 101) **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)
- 102) **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)
- 103) 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)
- 104) 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)
- 105) 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)
- 106) 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)
- 107) 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)
- 108) **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)
- 109) 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)
- 110) **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)
- 111) 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)
- 112) 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)
- 113) 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)

- 114) 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)
- 115) 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)
- 116) 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)
- 117) **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)
- 118) **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)
- 119) 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)
- 120) **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)
- 121) **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)
- 122) 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.
- 123) 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)
- 124) 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)
- 125) L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Albasini. Natural polyhydroxylated compounds as inhibitors of xanthine oxidase. *Die Pharmazie*, 1996, **51**, 994-995. (IF=0.869)
- 126) 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)
- 127) 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)
- 128) **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)
- 129) **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)
- 130) L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Albasini. Anthocyanidins as inhibitors of xanthine oxidase. *Die Pharmazie*, 1995, **50**, 573-574. (IF=0.869)

- 131) **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)
- 132) 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)
- 133) **G. Rastelli***, L. Costantino, A. Albasini. Solvent Effects on the Tautomerism of Apigeninidin. *Tetrahedron Lett.* 1994, **35**, 9751-9754. (IF=2.618)
- 134) 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)
- 135) L. Costantino, **G. Rastelli**, T. Rossi, M. Bertoldi, A. Albasini. Activité Antilipoperoxydante d'Extraits Polyphenoliques de *Ribes Nigrum L.* *Plantes Médicinales et Phytotherapie*, 1993, Tome XXVI, n°3, 207-214.
- 136) 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-dimethyluracil. 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)
- 137) **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)
- 138) 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)
- 139) 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)
- 140) 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)
- 141) **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)
- 142) 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)
- 143) 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)

18. 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/cmdc.200900251.

19. Arrticoli 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.

20. *Presentazioni poster a congressi*

- 1) A. Citarella, S. Belluti, D. Bonanni, D. Moi, L. Pinzi, L. Cuoghi, S. Di Ciolo, A. Silvani, S. Franchini, D. Passarella, C. Imbriano, S. Sorbi, C. Giannini, G. Rastelli. "Synthesis of 2-amino pyrrolo-pyrimidine derivatives as HDAC6/Hsp90 dual inhibitors". XLI Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Organica, CDCO Roma 2023, 10-14 Settembre 2023.
- 2) L. Bernal, L. Pinzi, G. Rastelli "Identification of drug repurposing candidates against prostate cancer through integration of chemoinformatics and machine learning approaches". XII Paul Ehrlich Euro-PhD Network (MedChem 2023 Greece), Thessaloniki, Greece July 16th -18th 2023, Atti PO-1-02 page 54
- 3) L. Pinzi, A. Tinivella, G. Rastelli, Identification of the molecular requirements of tau aggregation inhibitors through chemoinformatics analyses. XXVII National Meeting on Medicinal Chemistry, Bari 11-14 September 2022. PO-072
- 4) L. Pinzi, D. Moi, D. Bonanni, D., S. Belluti, P. Linciano, A. Citarella, S. Franchini, C. Sorbi, C. Imbriano, G. Rastelli. Discovery of pyrrolo-pyrimidine and purine-based HDAC6 inhibitors bearing different zinc-binding groups for the treatment of aggressive prostate cancer. XXVII National Meeting on Medicinal Chemistry, Bari 11-14 September 2022. PO-75
- 5) C. Sorbi, P. Linciano, L. Pinzi, S. Belluti, U. Chianese, R. Benedetti, D. Moi, L. Altucci, S. Franchini, C. Imbriano, G. Rastelli HDAC6 inhibitors with a new 3-hydroxy-isoxazone zinc binding group. XXVII National Meeting on Medicinal Chemistry, Bari 11-14 September 2022. PO-097
- 6) L. Bernal, L. Pinzi, G. Rastelli "Identification of potential drug repurposing opportunities for the treatment of advanced-stage prostate cancer through big data analysis". XI Paul Ehrlich Euro-PhD Network (MedChem 2022 Barcelona), Barcelona 14-16 Luglio 2022, Atti FP-15 page 77.
- 7) L. Pinzi, A. Tinivella, **G. Rastelli**. "Tackling polypharmacology and drug repurposing with the Ligadvisor webserver". "Recent Developments in Pharmaceutical Analysis (RDPA 2021)". Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia (Modena, ITALIA). Conferenza in modalità virtuale. 6 settembre 2021.
- 8) L. Pinzi, A. Tinivella, **G. Rastelli**. "LigAdvisor: a web platform designed for charting novel polypharmacology and drug repurposing routes from crystallographic ligands and known drugs". "European Chemical Biology Symposium 2021". EU-OPENSREEN in collaborazione con EuChemS Division of Chemistry for Life Sciences. Conferenza in modalità virtuale. 26-28 maggio 2021.

- 9) A. Tinivella, A. L. Benatti, L. Pinzi, **G. Rastelli**. "DrugBank and ChEMBL exploration for an in silico drug repurposing campaign". 12th European Workshop in Drug Design, Siena 19-24 May 2019, Poster.
- 10) L. Pinzi, **G. Rastelli** "Polypharmacology predictions in the Protein Data Bank". XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana. Paestum (SA), 10-14 settembre 2017. Abstract FAR P082 page 125.
- 11) 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**. "Povarov reaction for the synthesis of cyclopenta[c]quinolone derivatives as allosteric modulators of the CDK2 protein". 4th International Workshop on pericyclic reactions and synthesis of hetero- and carbocyclic systems. Milano June 28-30, 2017. Abstract P5, page 56.
- 12) G. Rastelli, A. Anighoro, M. Chripkova, L. Carrassa, M. Broggin, "Structure-based discovery of the first allosteric inhibitors of Cyclin-dependent kinase 2". 21st EuroQSAR, Verona 4-8 Settembre 2016, atti P225, pag 386.
- 13) L. Pinzi, G. Rastelli "Polypharmacology predictions in the Protein Data Bank", 21st EuroQSAR, Verona 4-8 Settembre 2016, atti P224, page 385
- 14) L. Pinzi, **G. Rastelli** "Rational design of dual inhibitors of Hsp90 and BRAF as a novel pharmacological approach against melanomas", XV Giornata della Chimica dell'Emilia Romagna, Modena 18 December 2015. Poster presentation.
- 15) P. Vincetti, F. Caporuscio, S. Kaptein, A. Gioiello, V. Mancino, Y. Suzuki, N. Yamamoto, E. Crespan, A. Lossani, G. Maga, **G. Rastelli**, D. Castagnolo, J. Neyts, P. Leyssen, G. Costantino, M. Radi. "Discovery of multi-target antivirals acting on both dengue virus NS3-NS5 interaction and c-Src/Fyb host kinases". XV Giornata della Chimica dell'Emilia Romagna, Modena 18 December 2015. Poster presentation.
- 16) **G. Rastelli**,* A. Anighoro, M. Chripkova, L. Carrassa, M. Broggin. "Structure-Based Discovery of the First Allosteric Inhibitors of Cyclin-Dependent Kinase 2". 2015 International Conference on Molecular Oncology 'From Signal Transduction to Cancer Precision Medicine', Candiolo Cancer Institute June 6-7 2015, Torino (Italy). Poster presentation, page 39.
- 17) A. Anighoro, D. Stumpfe, K. Heikamp, J. Bajorath, **G. Rastelli** "Combined ligand- and structure-based virtual screening for polypharmacology within the Hsp90 interactome", Computationally Driven Drug Discovery (CDDD) 3rd Meeting. Verona, March 4-6 2014. Poster presentation
- 18) A. Anighoro, **G. Rastelli** "Validazione di un modello computazionale per lo screening di ligandi di recettori accoppiati a protein G", XI Giornata della Chimica dell'Emilia Romagna, Modena 28 October 2011. Poster presentation.
- 19) **G. Rastelli**, G. Degliesposti, M.D. Parenti, C. Portioli. Improving enrichment and hit rate in virtual screening. "XXIst International Symposium on Medicinal Chemistry", Brussels (Belgium), September 5-9, 2010. *Drugs of the Future* 2010, 35 (Supplement A), 108.
- 20) F. Caporuscio, **G. Rastelli**, C. Imbriano, G. Degliesposti, A. Del Rio. Discovery of new aromatase inhibitors by high throughput docking. "International Society of Quantum Biology and Pharmacology" 2010 President's Meeting, Cetraro (Italy) 13-17 Giugno 2010. Poster Pag 12
- 21) A.J.M. Barbosa, F. Caporuscio, G. Mangiatordi, **G. Rastelli**, A. Del Rio. CoCoCo: a freely available multiconformational database of commercial compounds for HTVS purposes. Application to the FXR nuclear receptor. "2nd Chemoinformatics Strasbourg Summer School", Strasbourg 20-24 Giugno 2010, Poster P-1.
- 22) G. Degliesposti, **G. Rastelli**. Dimerization of human Hsp90: Binding free Energy calculation and per-residue free Energy decomposition. "IX Giornata della Chimica dell'Emilia Romagna", Bologna 4 Dicembre 2009. Poster P18, pag.33.

- 23) R. Forestiero, M. Sgobba, **G. Rastelli**. Binding of coumarin-based inhibitors at the CT domain of Hsp90: contribution for the rational anticancer drug design. "IX Giornata della Chimica dell'Emilia Romagna", Bologna 4 Dicembre 2009. Poster P23, pag.38.
- 24) G. Degliesposti, A. Del Rio, M. Sgobba, R. Forestiero, **G. Rastelli**. BEAR (Binding Estimation After Refinement) as a new tool for drug discovery. III Meeting "Nuove prospettive in chimica farmaceutica" Il Ciocco, Castelveccchio Pascoli (LU), 13-14 Febbraio 2009. Poster A2.P21
- 25) A. Del Rio, M. Sgobba, G. Degliesposti, **G. Rastelli**. Computational strategies for the design of protein kinases irreversible inhibitors targeting a conserved active site cysteine. III Meeting "Nuove prospettive in chimica farmaceutica" Il Ciocco, Castelveccchio Pascoli (LU), 13-14 Febbraio 2009. Poster B1.P7
- 26) A. Del Rio, M. Sgobba, G. Degliesposti, **G. Rastelli**. Computational strategy for the design of protein kinase irreversible inhibitors targeting a conserved active site cysteine. VIII Giornata della Chimica dell'Emilia Romagna. Ferrara, 16 Dicembre 2008. Atti P14.
- 27) G. Degliesposti, A. Del Rio, M. Sgobba, **G. Rastelli**. Binding free energy after refinement: a new tool for the selection of biologically active candidates. VIII Giornata della Chimica dell'Emilia Romagna. Ferrara, 16 Dicembre 2008. Atti P13.
- 28) M. Sgobba, **G. Rastelli**. Targeting the C-terminal domain of Hsp90: a new strategy to inhibit the chaperone. The 4th International Conference on the Hsp90 Chaperone Machine. Seon (Germany) 2-6 Ottobre 2008. Atti P43, pag. 104.
- 29) A. Del Rio, M. Sgobba, G. Degliesposti, **G. Rastelli**. Novel strategy for protein kinase inhibition: design of irreversible ligands targeting a conserved active site cysteine. XIX National Meeting on Medicinal Chemistry, Verona 14-18 Settembre 2008, Atti P-045 pag. 131.
- 30) A. Da Costa, V. Kasam, J. Salzemann, V. Bloch, G. Degliesposti, G. Rastelli, H. Y. Kang, D. Kim, N. Saidani, E. Marechal, A. Maas, V. Breton. Grid computing enabled identification of active molecules against targets implicated in malaria. IADIS International Conference Applied Computing 2008. 10-13 Aprile 2008, Algarve (Portogallo). Atti pag. 472.
- 31) A.L. Da Costa, V. Kasam, J. Salzemann, V. Bloch, V. Breton, **G. Rastelli**, G. Degliesposti, H. K. Kang, D. Kim, N. Saidani, E. Marechal. WISDOM: grid enabled identification of active molecules against targets implicated in Malaria. 3rd EGEE User Forum, Clermont-Ferrand, France. 11-14 Febbraio 2008.
- 32) M. Sgobba, A. Del Rio, G. Degliesposti, **G. Rastelli**. Design of irreversible protein kinase inhibitors targeting a conserved active site cysteine", VII Giornata della Chimica dell'Emilia Romagna, Modena 18 Gennaio 2008. Atti pag. 30.
- 33) G. Degliesposti, M. Sgobba, **G. Rastelli**. A post-docking refinement and rescoring study applied to the WISDOM virtual screening on *Plasmodium falciparum* DHFR, VII Giornata della Chimica dell'Emilia Romagna, Modena 18 Gennaio 2008. Atti pag. 14.
- 34) 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. Schwichtenberg, M. Sridhar, V. Kasam, Y.-T. Wu, M. Zimmermann. "Large Scale In Silico Screening on Grid Infrastructures". The Third International Life Science Grid Workshop 2006 (LSGrid2006), RIKEN Institute, Japan, 13-14 Ottobre 2006. Atti pag 1-14
- 35) M. Sgobba, **G. Rastelli**. The C-terminal domain of human Hsp90: a challenging binding site for the design of novel anticancer drugs. VI Giornata della Chimica dell'Emilia Romagna, Parma 24 Novembre 2006. Atti P-38
- 36) A. Coppi, **G. Rastelli**, P. Ulivi, G. Baggio, T. Rossi. Valutazione tossicologica di due nuovi inibitori della DHFR del *Plasmodium falciparum* e del *Plasmodium vivax*. XIV Congresso Nazionale della Società Italiana di Tossicologia, Roma 6-9 Febbraio 2006. Atti P-75 pag 258.
- 37) M. Sgobba, G. Degliesposti, L. Zanolì, A.M. Ferrari, **G. Rastelli**. New targets for antimalarial drugs: the C-term *Plasmodium falciparum* Hsp90. Second Joint Italian-Swiss Meeting on Medicinal Chemistry (ITCHMC2005), Modena 12-16 Settembre 2005. Atti P-71 pag 147.

- 38) **G. Rastelli**, S. Pacchioni, M.D. Parenti, A.M. Ferrari. Nuovi inibitori dell'enzima Diidrofolato reductasi del genere *Plasmodium falciparum*. XVII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, Pisa 6-10 Settembre 2004. Atti P-158 pag 224.
- 39) A.M. Ferrari, S. Pacchioni, M.D. Parenti, **G. Rastelli**. Discovery and development of new inhibitors of *Plasmodium falciparum* Dihydrofolate Reductase. 40th International Meeting on Medicinal Chemistry, Bordeaux-France 30 Giugno - 2 Luglio 2004. Atti D4 pag 87.
- 40) L. Costantino, **G. Rastelli**, A.M. Ferrari, M.C. Gamberini. Progettazione e sintesi di nuovi inibitori dell'enzima Aldoso Reduttasi. XVI Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica, Società Chimica Italiana, Sorrento 18-22 Settembre 2002, Atti L-32 pag. 66.
- 41) A.M. Ferrari, **G. Rastelli**, L. Costantino. Discovery and development of nitroderivatives: structure-activity relationship of a new class of aldose reductase inhibitors. First Magna Graecia Medicinal Chemistry Workshop on New Perspectives in Drug Research, Copanello (CZ) 10-13 Giugno 2001,. Atti PC-24 pag. 80.
- 42) A.M. Ferrari, L. Costantino, **G. Rastelli**. Discovery of new lead inhibitors of aldose reductase from docking and structure-based design. XVIth International Symposium on Medicinal Chemistry, Bologna 18-22 Settembre 2000,. Atti PB-33 pag. 309.
- 43) A. Albasini, **G. Rastelli**, L. Costantino, M.C. Gamberini, C. Vender, F. Scartezzini. *Echinacea purpurea* tilled in Italy: total polyphenol and alkanamides contents. IX Congress of the Italian Society of Pharmacognosy (SIPHAR), Modena 21-24 Ottobre 1998, Fitoterapia **1998**, vol LXIX Suppl. 5, pag. 41.
- 44) L. Costantino, **G. Rastelli**, M.P. Giovannoni, V. Dal Piaz, P. Vianello, G. Cignarella, D. Barlocco. Isoxazolo-[3,4-d]-pyridazin-7-(6H)-ones as potential aldose reductase inhibitors. XVth EFMC International Symposium on Medicinal Chemistry, Edimburgo 6-10 Settembre 1998, Atti pag.P19.
- 45) **G. Rastelli**, W. Sirawaraporn, D.V. Santi. Insight into the structural bases of antifolate resistance in *Plasmodium falciparum* Dihydrofolate reductase. XVth EFMC International Symposium on Medicinal Chemistry, Edimburgo 6-10 Settembre 1998, Atti pag.P161.
- 46) **G. Rastelli**, W. Sirawaraporn, D.V. Santi. Molecular dynamics of *Plasmodium falciparum* Dihydrofolate reductase: insight into the structural bases of antifolate resistance. International Society of Quantum Biology and Pharmacology President's Meeting: Molecular Structure and Dynamics in Biology, Elba 8-11 Settembre 1998, Atti pag.68.
- 47) P.G. Baraldi, M. Bergonzoni, P.A. Borea, **G. Rastelli**, K. Varani . Molecular dynamics investigation of the interaction of agonists and antagonists with the adenosine A2a receptor in water. 6th International Symposium on Adenosine and Adenine Nucleotides, Ferrara 19-24 Maggio 1998. Communication n° 3, addendum. Drug Development Research, Special issue, 1998, vol. 43, Addendum page 1.
- 48) A. Albasini, M. Melegari, L. Costantino, **G. Rastelli**. Contenuti in componenti di natura polifenolica, vitamina C, macro- e micro-elementi in piccoli frutti. Primo Convegno Internazionale sugli Alimenti Montani, S. Michele all'Adige 9-11 Ottobre 1996, Atti pag. 202-203.
- 49) S. Ghelli, **G. Rastelli**, A. Gelain, D. Barlocco, M. Rinaldi, P. Pecorari, F. Pelloni, F. Vezzali, D. Tondi, M.P. Costi. Conformational study of a new series of naphtalein derivatives acting as antifolate thymidylate synthase inhibitors through NMR and quantum chemical calculations. First Italian-Swiss Meeting on Medicinal Chemistry, Torino 23-26 Settembre 1997, Atti A71.
- 50) L. Costantino, **G. Rastelli**, P. Vianello, D. Barlocco, G. Cignarella, V. Dal Piaz, M.P. Giovannoni, A. Del Corso, U. Mura. Aldose reductase inhibitors: lead optimization. First Italian-Swiss Meeting on Medicinal Chemistry, Torino 23-26 Settembre 1997, Atti A67.
- 51) L. Costantino, **G. Rastelli**, M.C. Gamberini, A. Iannone, M. Staffieri, A. Albasini. Flavones as leads of aldose reductase inhibitors. First Italian-Swiss Meeting on Medicinal Chemistry, Torino 23-26 Settembre 1997, Atti A68.

- 52) **G. Rastelli**, L. Costantino, M.C. Gamberini, A. Albasini. Free energy perturbation calculations of the binding of new flavonic inhibitors to aldose reductase. First Italian-Swiss Meeting on Medicinal Chemistry, Torino 23-26 Settembre 1997, Atti A69.
- 53) L. Costantino, A. Iannone, **G. Rastelli**, M.C. Gamberini, M. Staffieri, A. Albasini, A. Del Corso, U. Mura. Antioxidants aldose reductase inhibitors. Society for Free Radical Research, 1997 Summer Meeting. 26-28 Giugno 1997, Abano, Padova. Atti P3/14.
- 54) D. Barlocco, G. Cignarella, P. Vianello, L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Del Corso, M. Cappiello, U. Mura. Synthesis, activity and molecular modelling of a new series of tricyclic pyridazinones as selective aldose reductase inhibitors. 5th International Symposium on the Chemistry and Pharmacology of Pyridazines, Sopron, Ungaria, 2-5 Ottobre 1996, Atti C-IL3.
- 55) D. Barlocco, G. Cignarella, P. Vianello, L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Del Corso, M. Cappiello, U. Mura. Sintesi, attività e molecular modelling di una nuova serie di inibitori selettivi dell'aldoso reductasi. XIII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, Paestum 23-27 Settembre 1996, Atti C-F1.
- 56) L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Albasini. A rational design of flavones as inhibitors of xanthine oxidase. XIII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, Paestum 23-27 Settembre 1996, Atti P-102.
- 57) **G. Rastelli**, L. Costantino, A. Albasini. A model of interaction of substrates and inhibitors with xanthine oxidase. XIII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, Paestum 23-27 Settembre 1996, Atti P-117.
- 58) **G. Rastelli**, L. Costantino, A. Albasini. From natural to synthetic flavones - C4'-substituted flavones as potent inhibitors of xanthine oxidase. In "Polyphenols Communications 96", Ed. J. Vercauteren, C. Chèze, M.C. Dumon, J.F. Weber, pag. 469-470. XVIIIth International Conference on Polyphenols, Bordeaux (Fr), 15-18 Luglio 1996.
- 59) A. Albasini, M. Melegari, A. Bianchi, **G. Rastelli**, L. Costantino, F. Scalabrini. Analisi di macro- e microelementi in piccoli frutti mediante spettrometria a plasma induttivo. VIII Convegno della Società Italiana di Fitochimica, Arzana (Nuoro) 22-25 Maggio 1996, Atti pag. 19.
- 60) L. Costantino, **G. Rastelli**, D. Barlocco, P. Vianello, G. Cignarella. Synthesis, activity and molecular modelling of a new series of aldose reductase inhibitors. II Congresso Congiunto Italiano-Spagnolo di Chimica Farmaceutica, Ferrara 30 Agosto-3 Settembre 1995, Atti P192.
- 61) **G. Rastelli**, L. Costantino, A. Albasini. Equilibri di Dissociazione e Tautomeria dell'Apigeninidina: Relazioni con l'Attività Inibitrice della Xantina Ossidasi. 7° Convegno Nazionale della Società Italiana di Fitochimica, Urbino 15-17 Settembre 1994, C12, Atti pag. 36.
- 62) **G. Rastelli**. "Molecular Modelling e Analisi QSAR di Derivati Flavonici Implicati in Processi Biologici di tipo Ox/Redox". X Seminario Nazionale per Dottorandi in Scienze Farmaceutiche, Urbino 6-10 Settembre 1993, Atti pag. 105.
- 63) L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Albasini. Proton dissociation and tautomeric constants of apigeninidin". In "Polyphenols 94", Ed. R. Brouillard, M. Jay, A. Scalbert, INRA Editions 1994, pag. 187-188. XVIIth International Conference of the Groupe Polyphenols, Palma de Mallorca, 23-27 Maggio 1994.
- 64) **G. Rastelli**, L. Costantino, A. Albasini. Inhibitory Activity of Apigeninidin towards the Xanthine Oxidase Enzyme. In "Polyphenols 94", Ed. R. Brouillard, M. Jay, A. Scalbert, INRA Editions 1994, pag. 397-398. XVIIth International Conference of the Groupe Polyphenols, Palma de Mallorca, 23-27 Maggio 1994.
- 65) L. Costantino, **G. Rastelli**, T. Rossi, M. Bertoldi, A. Albasini. Antilipoperoxidant Activity of Polyphenolic Crude Extracts of some Edible Fruits. 40th Annual Congress on Medicinal Plant Research, Trieste 1-5 Settembre 1992. *Planta Medica* 1992, **58**, A662.

- 66) **G. Rastelli**, L. Costantino, A. Albasini. Studio degli Equilibri in Soluzione delle Antocianidine. 6° Convegno Nazionale della Società Italiana di Fitochimica, Fiuggi 21-23 Maggio 1992, Atti pagg. 15-18.
- 67) L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Albasini. Determinazione spettrofotometrica dell'attività inibente l'enzima xantina ossidasi da parte di flavonoli. IV° Convegno su Recenti Sviluppi e Applicazioni nell'Analisi Farmaceutica, Bologna 29-31 Ottobre 1991, Atti, pag. 115.
- 68) L. Costantino, A. Albasini, **G. Rastelli**. Activity of Polyphenolic Crude Extracts Against Superoxide Radicals. X Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, Siena, 16-20 Settembre 1991, Atti, pag. 107.
- 69) M.P. Costi, **G. Rastelli**, M. Cevolani, P. Pecorari. Nucleophilic Addition of NH_2OR to uracil and 5-fluorouracil. I° Reaction Rates and Products Stabilities. X Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, Siena, 16-20 Settembre 1991, Atti, pag. 104.
- 70) **G. Rastelli**, M.P. Costi, P. Pecorari. Nucleophilic Addition of NH_2OR to uracil and 5-fluorouracil. II° A Theoretical Study of the Molecular Interactions and of the Reaction Path. X Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, Siena, 16-20 Settembre 1991, Atti, pag. 105.
- 71) **G. Rastelli**, L. Costantino, A. Albasini. Theoretical Study of Anthocyanidins: Structure Elucidation and Stability of their Different Forms", CISC191, Chianciano Terme 6-11 Ottobre 1991, Atti Volume II, pag. 455.
- 72) P.G. De Benedetti, M.C. Menziani, **G. Rastelli** and M. Cocchi. QSAR analysis using theoretical molecular descriptors in 2,4-diamino-6,7-dimethoxy quinazolines α 1-adrenoceptor antagonists. In "*QSAR: Rational Approaches to the Design of Bioactive Compounds*", Ed. by C. Silipo and A. Vittoria, Elsevier 1991, pag. 435.

In fede,
Modena 27 Luglio 2024

Giulio Rastelli

