



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, 183 - 41100 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'anidrasa 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:

- 1999-presente Responsabile scientifico del laboratorio MMDDLab (Molecular Modelling & Drug Design Lab, www.mmddlab.unimore.it), Università di Modena e Reggio Emilia.
- 2005-presente 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.
- 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:*

- 2016-presente: Presidente della Commissione Monitoraggio Carriere per il corso di laurea in CTF, Università di Modena e Reggio Emilia.
- 2016-presente: Rappresentante dell'area Farmacia nella Giunta del Dipartimento di Scienze della Vita, Università di Modena e Reggio Emilia.
- 2009-2010: membro del Comitato di Ateneo per il reclutamento dei ricercatori a tempo determinato, in qualità di rappresentante dell'area 03 Scienze Chimiche.
- Responsabile della Commissione Informatica del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche.
- 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
- Referee per numerose riviste internazionali peer-reviewed nei settori della chimica farmaceutica, chimica, biologia, modellistica molecolare, biologia strutturale, chimica computazionale.
- Membro del Comitato Organizzatore di ITCHMC 2005, Second Joint Italian-Swiss Meeting on Medicinal Chemistry, September 12-16, 2005 – Modena (Italy)
- Co-organizzatore del workshop internazionale "Medicinal Chemistry in Parasitology", 23 Gennaio 2004, Modena (Italy)

4. *Partecipazione a comitati editoriali e società:*

- Membro dell'Editorial Advisory Board della rivista *Current Medicinal Chemistry* (ISSN 1875-533), Dic 2016-presente
- Membro ad invito nella prestigiosa Faculty of 1000 (F1000) per la sezione "Drug Discovery & Design", Ott 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) (Maggio 2013-presente).
- Membro dell'International Advisory Board della rivista *Annals of Tropical Medicine and Public Health* (ISSN:1755-6783), Marzo 2011-presente.
- Membro dell'Editorial Board della rivista *Science Asia* (ISSN 1513-1874), rivista della Science Society of Thailand (www.scienceasia.org). (Marzo 2008-presente).
- Membro della Società Chimica Italiana (SCI), Divisione di Chimica Farmaceutica.
- Membro della American Chemical Society (ACS), Divisioni di Medicinal Chemistry e di Biological Chemistry (2012-presente).
- Socio dell'Associazione Italiana per la Ricerca sul Cancro (AIRC) (2009-presente).

5. Riconoscimenti e Premi:

- 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.
- 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.

- 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).
- Certificato di riconoscimento ricevuto da “ACS Publications” per le attività di reviewer di manoscritti sottomessi alle riviste dell’American Chemical Society (2015).
- Certificato di “Outstanding Reviewer in 2013” 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.
- Vincitore della procedura selettiva finalizzata all’attribuzione dell’incentivo una tantum previsto per l’anno 2012 (Decreto Rettorale n 158 del 17/10/2014).
- 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 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.
- Certificato di “Outstanding Reviewer in 2015” per la rivista Journal of Medicinal Chemistry (ACS).
- Certificato di “Outstanding Reviewer in 2016” per la rivista Journal of Medicinal Chemistry (ACS).
- ACS publication award “Certificate of Recognition in 2016” for valued contributions to ACS publications.
- Richiesta da parte della Swiss National Science Foundation (SNSF) di valutare domande di finanziamento, 2014.
- Richiesta di valutare due domande di finanziamento da parte di “The Israel Science Foundation” (ISF), 2009 e 2010.
- Richiesta da parte di CINECA di valutare progetti di calcolo PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), Feb 2012.
- Richiesta da parte della Portuguese Foundation for Science and Technology (FCT) di valutare domande di finanziamento per la ricerca scientifica, 2009.
- Richiesta da parte di CINECA di valutare progetti di calcolo ISCRA (Italian SuperComputing Resource Allocation), 2010.
- Richiesta da parte del French National Cancer Institute (INCa) di far parte del Comitato di Valutazione Scientifica per la valutazione di domande di finanziamento per progetti di ricerca sul cancro, call “Biology and Basic Sciences for Cancer Research 2017”, Ott 2016.
- 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
- Citazione dell'articolo "Polypharmacology: Challenges and opportunities in drug discovery". (*J. Med. Chem.* 2014, 57, 7874-7887) su Wikipedia alla voce "Polypharmacology".

6. **Indici bibliometrici:**

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

Indici bibliometrici (Luglio 2017): H-index=28, #citazioni totali=2667, (banca dati Scopus).

7. **Brevetti:**

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

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

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

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

9. **Finanziamenti per la ricerca scientifica:**

- Progetto di Ricerca Orientata, Università di Modena e Reggio Emilia, Agosto 1998-Settembre 2000, dal titolo "Enzima diidrofolato reductasi del genere *Plasmodium falciparum* e suoi mutanti resistenti ai farmaci antimalarici classici. Molecular modelling della struttura tridimensionale dell'enzima nativo e dei mutanti resistenti e progettazione di inibitori attivi sulle forme resistenti". Lire 60 milioni. *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, Lire 10.800.000. *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, Lire 10.800.000. *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 Dihydrofolato reductasi del genere *Plasmodium falciparum* quali nuovi lead antimalarici”, Marzo 2001, Lire 16 Milioni. *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, 12.000 dollari. *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”, 115.000 euro (totale 589.995 euro). *Ruolo: Principal Contractor.*
- FISR (Fondo Integrativo Speciale per la Ricerca del MIUR)1504 Ric, 2002-2004 “Molecular modeling and design of pharmaceutically active polyketides”, 49.579,86 euro. *Ruolo: Coordinatore della ricerca.*
- Banca Popolare dell’Emilia Romagna, finanziamento per la ricerca su progettazione e sviluppo di nuovi potenziali farmaci antimalarici, 2007-2011, 14.000 euro. *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.* 140.000 euro.
- 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, 46.600 euro. *Ruolo: Coordinatore del progetto.*
- Contratti PaP con Recordati SpA (MI).
- Spinner 2013 (Regione Emilia Romagna), Percorsi di mobilità e collaborazione internazionale. Progetto “DynPharmaGel”, Prot. N 099/12, 2012-2013, 16.200 euro. *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. 91.268 euro. *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 di 23.000 euro 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. Total 2,555,534.16 euro, budget di UNIMORE 129.030,66 euro. Role: PI of partner organization

10. Finanziamenti competitivi per progetti di calcolo scientifico

- 1) 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.
- 2) 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.
- 3) IS CRA (Italian Super Computing Resource Allocation), Progetto AntiCBX7, 2015, Project HP10C68GKI. Class C project, 75k CPU hours on GALILEO.

11. Network collaborazioni scientifiche più rilevanti

Collaboration Network

The map graph below displays (up to) the top 500 geographic locations for this researcher's co-authors. Scroll over the map and place your cursor on a pin to view city, state, and country information. Clicking on the pin will display bibliographic data for the paper that has cited the researcher's publication(s).



12. Attività di reviewing

- *Reviewer di finanziamenti per:*
Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca (MIUR), National Science Foundation (NSF), French National Cancer Institute (INCa), Swiss National Science Foundation (SNSF), Israel Science Foundation (ISR), Portuguese Foundation for Science and Technology (FCT), ISCRA (Italian SuperComputing Resource Allocation), PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe).
- *Regular Reviewer di manoscritti per:*
J Med Chem, Bioorg Med Chem, Bioorg Med Chem Lett, J Am Chem Soc, Biophys Chem, J Comput-Aided Mol Des, J Comput Chem, Eur J Med Chem, Chem Biol Drug Des, J Mol Graph Model, Curr Med Chem, Lett Drug Des Discov, Int J Parasitol, ScienceAsia, J Chem Inf Model, J Phys Chem, Biology, J Chem Theory Comput, Biochim Biophys Acta, Mol Informatics, Acta Biochimica et Biophysica Sinica, Drug Discov Today, Plos One, Int J Mol Sci, MedChemComm, Mol Biosyst, ACS Med Chem Lett., Scientific Reports (Nature), Future Med Chem ed altri.

13. Organizzazione di Conferenze, Workshops o Meetings

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

- ITCHMC 2005, Second Joint Italian-Swiss Meeting on Medicinal Chemistry. September 12-16, 2005 – Modena (Italy)
- International workshop on "Medicinal Chemistry in Parasitology", January 23, 2004. Modena (Italy).

- 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.
- 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.

14. *Attività di Ricerca più recenti*

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

a) Responsabile scientifico del laboratorio MMDDLab (Molecular Modelling & Drug Design Lab) di UNIMORE.

L’attività scientifica del laboratorio è principalmente rivolta alla progettazione, sviluppo e ottimizzazione mediante procedure computazionali di potenziali farmaci attivi su sistemi biologici di interesse farmaceutico. Il laboratorio è completamente attrezzato con strumentazione computazionale (hardware e software) all’avanguardia per il drug design. La sinergia tra aspetti computazionali e sperimentali assieme alla promozione di una ricerca di carattere internazionale ha reso possibile l’instaurarsi di strette collaborazioni tra ricercatori con diversi background (chimica, biologia, medicina, biotecnologie) ed il coordinamento o la partecipazione di progetti a carattere internazionale/multidisciplinare.

Le metodiche utilizzate nel laboratorio includono structure-based drug design, ligand-based e structure-based virtual screening, dinamica molecolare, homology modelling, QSAR, calcoli quantomeccanici, analisi di farmacofori, predizioni di proprietà ADME/Tox, chemoinformatica e analisi e gestioni di librerie molecolari.

b) Coordinatore italiano 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

Nell’ambito del programma 5FP INCO-DEV il progetto è stato sviluppato da un consorzio di 4 unità appartenenti a quattro paesi: Gran Bretagna (Prof Gordon Lowe), Italia (Prof Giulio Rastelli), Tailandia (Prof Yongyuth Yuthavong), India (Prof VS Chauhan). Obiettivo del progetto è la progettazione, sintesi e valutazione biologica di inibitori antimalarici delle Dihydrofolato reductasi (DHFR) dei generi *Plasmodium falciparum* e *Plasmodium vivax*, con particolare riferimento alle forme farmaco-resistenti delle proteine mutate.

c) Responsabile della collaborazione scientifica con Kosan Biosciences Inc, 2000-2006

Collaborazione scientifica con la ditta farmaceutica Kosan Biosciences Inc (Hayward, CA USA) per la progettazione di inibitori di Hsp90 e protein kinasi. Gli studi hanno riguardato la progettazione e sviluppo di derivati della geldanamicina (ad es 17-DMAG), alcuni dei quali ora in sperimentazione clinica, e di inibitori irreversibili a struttura macrolattonica (ad es derivati dell’ipotemicina) delle protein chinasi. Le ricerche sono state oggetto di quattro pubblicazioni su riviste internazionali peer-reviewed, una delle quali ha ricevuto il premio Bioorganic & Medicinal Chemistry Most Cited Paper 2003-2006, un’altra è Top 25 hottest article, due strutture cristalline depositate nel PDB (codici 1OSF, 3C9W). 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, e a vari contratti di ricerca.

d) Coordinatore del progetto AIRC “Novel irreversible protein kinase inhibitors targeting a conserved active site cysteine” (2008-2010)

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

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

Il progetto si inserisce all'interno del progetto europeo EGEE (Enabling Grids for E-science). Sul progetto ha collaborato con Vincent Breton (CNRS, Francia), Martin Hofmann (Fraunhofer Institute SCAI, Bonn), Doman Kim (Chonnam National University, South Korea), ed altre istituzioni a livello internazionale. Il progetto è basato sul virtual screening su piattaforme di calcolo GRID per lo screening e l'identificazione di nuove molecole ad attività antimalarica. Tale progetto ha portato ad un brevetto, cinque 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.

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

Progetto regionale Spinner per lo sviluppo di una piattaforma computazionale di screening virtuale di potenziali farmaci al servizio delle aziende farmaceutiche e biotecnologiche. Il gruppo del Prof Rastelli ha messo a punto una tecnologia computazionale, denominata BEAR, per lo screening di farmaci mediante docking, dinamica molecolare e metodi di scoring basati sul calcolo dell'energia libera di binding. Il progetto ha consentito di avviare contatti e consolidare partnership con varie imprese presenti sul territorio nazionale. Ha portato nel complesso a tredici pubblicazioni scientifiche peer-reviewed e tre pubblicazioni divulgative, la partecipazione a vari eventi di promozione e fiere, e la redazione di un business plan per una potenziale spin-off accademica.

g) Coordinatore del progetto Spinner 2013, Percorsi di mobilità e collaborazione internazionale. Progetto "DynPharmaGel", 2012-2013

Progetto regionale di trasferimento tecnologico. Questo progetto si inserisce all'interno di un progetto più ampio, promosso dal partner aziendale ProLynx LLC (Hayward, CA USA), un'azienda biofarmaceutica americana. Il progetto ha come scopo lo sviluppo di modelli di simulazione per l'ottimizzazione del rilascio controllato di farmaci da supporti di gel (idrogel) basati su Tetra-PEG. Al progetto partecipano il Prof Rastelli (Coordinatore), il Prof Daniel Santi (ProLynx LLC, USA, ex professore ordinario di biochimica e chimica farmaceutica alla UCSF e fondatore e/o cofondatore e presidente 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 ad una pubblicazione congiunta su *Macromolecules* 2015, 48, 7359-7369 (IF=5.8).

h) Coordinatore del progetto AIRC "Design and development of CDK2 and EGFR type III allosteric inhibitors as anticancer drugs" (2015-2017)

Il progetto ha come obiettivo la progettazione, sintesi e valutazione biologica e farmacologica di inibitori allosterici di tipo III delle proteine chinasi CDK2 ed EGFR ad attività antitumorale. Il Prof Rastelli è il coordinatore del progetto finanziato da AIRC (IG 15993). I partecipanti al team includono 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).

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

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

l) Responsabile scientifico dell'unità di ricerca UNIMORE nel progetto H2020-MSCA-ITN-EID “Big Data in Chemistry” (BIGCHEM) (2016-2019)

Dal 2016 il prof Rastelli è 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 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 riguarda la “polifarmacologia”, un hot topic nel campo del drug discovery.

Nel complesso, la ricerca ha finora portato a cinque pubblicazioni scientifiche peer-reviewed.

15. Attività di trasferimento tecnologico

- 1) 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).
- 2) 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.
- 3) 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.
- 4) Stesura del 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.
- 5) 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”

- 6) 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).
- 7) 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.
- 8) Selezione di BEAR in qualità di finalista per la partecipazione alla StartCup2010 (competizione per i migliori progetti innovativi imprenditoriali). StartCup é la business plan competition dell'Emilia-Romagna, affiliata al PNI (Premio Nazionale per l'Innovazione). La competizione consiste in una gara tra progetti imprenditoriali innovativi per la creazione di start-up attive sul territorio regionale.
- 9) Produzione di un flyer illustrante i servizi offerti da BEAR e distribuzione del flyer alle aziende farmaceutiche e biotecnologiche italiane.
- 10) Partecipazione ai percorsi di accrescimento delle competenze in "Gestione delle Risorse umane", "Business plan" e "Project management" facenti parte del percorso Spinner (2010).
- 11) 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).
- 12) Coordinatore di un'azione "Spinner 2013" finanziata dalla Regione Emilia Romagna dal titolo "DynPharmaGel", all'interno dei "Percorsi di mobilità e collaborazione internazionale 2012-2013". Spinner è un'azione del Programma Operativo Regionale (POR) 2007-2013 del Fondo Sociale Europeo (FSE), Asse IV Capitale Umano, Obiettivo 2 "Competitività regionale e Occupazione" promossa dall'Assessorato Scuola, Formazione professionale, Università e ricerca, Lavoro della Regione Emilia-Romagna. Il progetto ha previsto la mobilità della Dott.ssa Miriam Sgobba verso la ditta ProLynx LLC (San Francisco, CA www.prolynxllc.com) e la collaborazione internazionale con ProLynx (Daniel V. Santi) e UCSF (Andrej Sali). L'azione ha permesso di sviluppare una tecnologia computazionale in grado di predire il rilascio di farmaci da Tetra-PEG hydrogels degradabili, e poi di applicarla a sistemi reali complessi. I risultati scientifici sono pubblicati sulla rivista *Macromolecules* (Reid, M. Sgobba, B. Raveh, G. Rastelli, A. Sali, D.V. Santi. Analytical and simulation-based models for drug release and gel-degradation in a Tetra-PEG hydrogel drug-delivery system. *Macromolecules* 2015, 48, 7359-7369) IF=5.8.

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

- 1) **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.

- 2) **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
- 3) **Seminario ad invito: G. Rastelli**. La polifarmacologia: un approccio emergente nel drug discovery. Italfarmaco, Milano 18 Febbraio 2015.
- 4) **Seminario ad invito: G. Rastelli**. La polifarmacologia: un approccio emergente nel drug discovery. Università degli Studi Magna Græcia, Catanzaro 26 Novembre 2013.
- 5) **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.
- 6) **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.
- 7) **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.
- 8) **Seminario ad invito: G. Rastelli**. BEAR, una nuova metodologia per lo screening virtuale. SigmaTau, Pomezia (RM) 21 Ottobre 2010.
- 9) **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.
- 10) **Conferenza ad invito: G. Rastelli, G. Degliesposti**. Molecular dynamics in WISDOM, comunicazione orale al BioinfoGRID Symposium 2007. Milano 10-13 Dicembre 2007.
- 11) **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.
- 12) **Seminario ad invito: G. Rastelli**. “New approaches for virtual screening”. Nerviano Medical Sciences. Milano 16 Ottobre 2007.
- 13) **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.
- 14) **Seminario ad invito: G. Rastelli**. “AMBER overview”, Dipartimento di Biologia dell’Università Roma3. Roma, 3 Novembre 2006.
- 15) **Conferenza ad invito: G. Rastelli**. Structure-based design of novel antimalarials. Workshop on “Medicinal Chemistry in Parasitology”, Modena 23 Gennaio 2004. Atti pag 17.
- 16) **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.

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

- 17) **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.
- 18) **G. Rastelli**, “Structure-based polypharmacology in drug design”. XXIV National Meeting in Medicinal Chemistry, Perugia 11-14 Settembre 2016. Comunicazione orale.
- 19) **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.
- 20) **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.

- 21) **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.
- 22) **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.
- 23) **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.
- 24) **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.
- 25) **G. Rastelli**. Enhancing success rates in virtual screening. "MedChem Europe", Munich (Germany) 28-29 March 2011. Oral communication
- 26) **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
- 27) **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.
- 28) **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.
- 29) **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.
- 30) **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.
- 31) **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.
- 32) **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.
- 33) **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.
- 34) **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.
- 35) **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

- 36) **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.

18. *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, la Facoltà di Scienze M.F.N., la Facoltà di Bioscienze e Biotecnologie, e il Dipartimento di Scienze della Vita dell'Università di Modena e Reggio Emilia:

AA 1996-1997

- Assistenza al laboratorio di "*Analisi dei medicinali I*" per i CdL in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche e in Farmacia.

AA 1997-1998

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

AA 1998-1999

- Assistenza al laboratorio di "*Analisi dei medicinali II*" per i CdL in Chimica e Tecnologie 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 Tecnologie Farmaceutiche.

AA 1999-2000

- Corso di "*Progettazione e sintesi di farmaci*", CdL in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche.

AA 2000-2001

- Corso di "*Progettazione e sintesi di farmaci*", CdL in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche.
- Corso di "*Basi molecolari dell'attività dei farmaci*", CdL in Chimica e Tecnologie 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.

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

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 I*” 9CFU (5CFU di teoria e 4CFU di laboratorio), CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 2° anno

AA 2015-2016

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

AA 2016-2017

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

- Corso di “Progettazione dei Farmaci” 4CFU, CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 4° anno.

Il Prof. Rastelli ha inoltre seguito numerosi studenti nella preparazione ed elaborazione di tesi di laurea ed è stato supervisore di numerose tesi sperimentali. Infine è stato supervisore di numerosi studenti di Dottorato di ricerca in chimica farmaceutica.

19. *Elenco delle pubblicazioni*

- 1) 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).
- 2) E. Bonandi, M.S. Christodoulou, G. Fumagalli, D. Perdicchia, **G. Rastelli**, D. Passarella. 1,2,3-Triazole ring as bioisostere in medicinal chemistry. *Drug Discov. Today* 2017, 10.1016/j.drudis.2017.05.014 (IF=5.625).
- 3) 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, doi: 10.3389/fphar.2017.00298. (IF=4.418)
- 4) 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)
- 5) 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).
- 6) 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).
- 7) 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)
- 8) 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)
- 9) 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).
- 10) 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)
- 11) 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).
- 12) 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)
- 13) **G. Rastelli***, L. Pinzi. Computational polypharmacology comes of age. *Front. Pharmacol.* 2015, 6, 157. doi: 10.3389/fphar.2015.00157 (IF=3.802)
- 14) 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)

- 15) 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).
- 16) 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)
- 17) C. Micelli, **G. Rastelli***. Histone deacetylases: structural determinants of inhibitor selectivity. *Drug Discov. Today* 2015, 20, 718-735. (IF=6.691)
- 18) 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)
- 19) A. Anighoro, J. Bajorath, **G. Rastelli***. Polypharmacology: Challenges and opportunities in drug discovery. *J. Med. Chem.* 2014, 57, 7874-7887. (IF=5.614)
- 20) **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).
- 21) **G. Rastelli***. Dimerization hot spots in the structure of human Hsp90. *Med. Chem. Commun.*, 2014, 5, 797-801. (IF=2.722).
- 22) 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.
- 23) A. Anighoro, **G. Rastelli***. BEAR, a molecular docking refinement and rescoring method. *Comput. Mol. Biosci.* 2013, 3, 27-31.
- 24) 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)
- 25) **G. Rastelli***. Emerging topics in structure-based virtual screening. *Pharm. Res.* 2013, 30, 1458-1463. (IF=4.742).
- 26) 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)
- 27) 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)
- 28) 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)
- 29) 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)
- 30) 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)
- 31) 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)
- 32) **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.
- 33) **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.
- 34) 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)

- 35) 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)
- 36) **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)
- 37) 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)
- 38) **G. Rastelli***. Disegnare i farmaci al computer. *Linx Magazine* 2009, 4, 14-19.
- 39) M. Sgobba, **G. Rastelli***. Structure-based and in silico design of Hsp90 inhibitors. *ChemMedChem* 2009, 4, 1399-1409. (IF=3.306)
- 40) 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)
- 41) 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)
- 42) **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)
- 43) 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)
- 44) 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.
- 45) **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)
- 46) 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)
- 47) 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)
- 48) 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)
- 49) 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. Milanese, **G. Rastelli**, M. Reichstadt, J. Salzemann. Virtual screening on large scale grids. *Parallel Comput.* 2007, 33, 289-301. (IF=1.086)
- 50) 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. Milanese, **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.
- 51) 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)
- 52) **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)
- 53) 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)
- 54) 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)
- 55) **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)
- 56) 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)
- 57) **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)
- 58) 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)
- 59) 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)
- 60) I. Cecconi, A. Scaloni, **G. Rastelli**, M. Moroni, P.G. Vilardo, L. Costantino, M. Cappiello, D. Garland, D. Carper, J.M. Petrash, A. Del Corso, U. Mura. Oxidative modification of Aldose Reductase induced by copper ion. Definition of the metal-protein interaction mechanism. *J. Biol. Chem.* 2002, **277**, 42017-42027. (IF=5.328)
- 61) 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)
- 62) **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)
- 63) **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)
- 64) 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)
- 65) 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)
- 66) D. Rakowitz, G. Heinisch, P. Lukavsky, S. Kiendler, C. Trenkwaldler, 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)
- 67) 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)

- 68) 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)
- 69) **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)
- 70) 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)
- 71) **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)
- 72) 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)
- 73) 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)
- 74) 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)
- 75) 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)
- 76) I. Cecconi, M. Moroni, P.G. Vilaro, 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)
- 77) 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)
- 78) **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)
- 79) **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)
- 80) 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)
- 81) **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)
- 82) **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)
- 83) 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.
- 84) 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)

- 85) 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)
- 86) L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Albasini. Natural polyhydroxylated compounds as inhibitors of xanthine oxidase. *Die Pharmazie*, 1996, **51**, 994-995. (IF=0.869)
- 87) 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)
- 88) 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)
- 89) **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)
- 90) **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)
- 91) L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Albasini. Anthocyanidins as inhibitors of xanthine oxidase. *Die Pharmazie*, 1995, **50**, 573-574. (IF=0.869)
- 92) **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)
- 93) 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)
- 94) **G. Rastelli***, L. Costantino, A. Albasini. Solvent Effects on the Tautomerism of Apigeninidin. *Tetrahedron Lett.* 1994, **35**, 9751-9754. (IF=2.618)
- 95) 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)
- 96) L. Costantino, **G. Rastelli**, T. Rossi, M. Bertoldi, A. Albasini. Activité Antilipoperoxydante d'Extraits Polyphenoliques de *Ribes Nigrum L.* *Plantes Médicinales et Phytothérapie*, 1993, Tome XXVI, n°3, 207-214.
- 97) G. Vampa, L. Antolini, **G. Rastelli**, M.P. Costi, M. Rinaldi, P. Pecorari. Crystal and Molecular Structures of 5-fluoro-3-methyl-5-chloro-3-methyl- and 5-chloro 1,3-dimethyl-uracil. Hydrogen-bond Patterns through X-Ray and Molecular Orbital Analysis. *J. Chem. Res. (S)* 1993, 6, 212-213; (M) 1993, 1346-1379. (IF=0.550)
- 98) **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)
- 99) 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)
- 100) 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)
- 101) 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)
- 102) **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)

- 103) 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)
- 104) M. Cocchi, M.C. Menziani, **G. Rastelli**, P.G. De Benedetti. QSAR Analysis in 2,4-Diamino,6,7-dimethoxy Quinoline Derivatives Quinoline Derivatives - α 1-Adrenoceptor Antagonists – Using the Partial Least Squares (PLS) Method and Theoretical Molecular Descriptors. *Quantitative Structure-Activity Relationships* 1990, **9**, 340-345. (IF=1.397)

20. *Book reviews*

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

21. *Presentazioni poster a congressi*

- 1) 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.
- 2) L. Pinzi, G. Rastelli “Polypharmacology predictions in the Protein Data Bank”, 21st EuroQSAR, Verona 4-8 Settembre 2016, atti P224, page 385
- 3) 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.
- 4) 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.
- 5) **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.
- 6) 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
- 7) 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.
- 8) **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.
- 9) 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
- 10) 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.

- 11) 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.
- 12) 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.
- 13) 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, Castelvevchio Pascoli (LU), 13-14 Febbraio 2009. Poster A2.P21
- 14) 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, Castelvevchio Pascoli (LU), 13-14 Febbraio 2009. Poster B1.P7
- 15) 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.
- 16) 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.
- 17) 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.
- 18) 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.
- 19) 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.
- 20) 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.
- 21) 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.
- 22) 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.
- 23) 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
- 24) 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
- 25) 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.

- 26) M. Sgobba, G. Degliesposti, L. Zanoli, 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.
- 27) **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.
- 28) 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.
- 29) 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.
- 30) 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.
- 31) 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.
- 32) 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.
- 33) 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.
- 34) **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.
- 35) **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.
- 36) 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.
- 37) 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.
- 38) 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 naphthalen 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.
- 39) 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.

- 40) 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.
- 41) **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.
- 42) 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.
- 43) 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.
- 44) 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.
- 45) 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.
- 46) **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.
- 47) **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.
- 48) 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.
- 49) 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.
- 50) **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.
- 51) **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.
- 52) 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.
- 53) **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.
- 54) 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.

- 55) **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.
- 56) L. Costantino, **G. Rastelli**, A. Albasini. Determinazione spettrofotometrica dell'attività inibente l'enzima xantina ossidasi da partedi flavonoli. IV° Convegno su Recenti Sviluppi e Applicazioni nell'Analisi Farmaceutica, Bologna 29-31 Ottobre 1991, Atti, pag.115.
- 57) 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.
- 58) 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.
- 59) **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.
- 60) **G. Rastelli**, L. Costantino, A. Albasini. Theoretical Study of Anthocyanidins: Structure Elucidation and Stability of their Different Forms", CISC91, Chianciano Terme 6-11 Ottobre 1991, Atti Volume II, pag. 455.
- 61) 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.