

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

Procedura di valutazione per la chiamata a professore di I fascia da ricoprire ai sensi dell'art. 24, comma 6, della Legge n. 240/2010 settore concorsuale 03/D1 - Chimica e Tecnologie Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutico-Alimentari (settore scientifico-disciplinare CHIM/08 - Chimica Farmaceutica), presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Codice concorso 4092

Giulio Vistoli
CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	VISTOLI
NOME	GIULIO
DATA DI NASCITA	29 MAGGIO 1968

1. Curriculum degli Studi

- 1998** Dottore di Ricerca in Chimica del Farmaco, discutendo una Tesi dal titolo "Nuovo descrittore tridimensionale dell'idropaticità molecolare".
- 1994-1997** Svolgimento del Dottorato di Ricerca in Chimica del Farmaco presso l'Istituto di Chimica Farmaceutica e Tossicologica, Facoltà di Farmacia, Università degli Studi di Milano (X ciclo, docente guida Prof. L. Villa).
- 1996-1997** Visiting scientist presso i laboratori di ricerca dell'Institut de Chemie Therapeutique dell'Università di Lausanne (CH), sotto la guida del Prof. B. Testa.
- 1994** Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, presso l'Università degli Studi di Milano, con il massimo dei voti e lode, discutendo una tesi dal titolo: "Nuovo approccio dinamico per la descrizione della lipofilia molecolare".
- 1987** Diploma di Maturità Classica (votazione 60/60) presso il Liceo Classico Statale "Pietro D'Anghiera" di Arona (NO).

2. Curriculum Professionale

- Posizione attuale** Professore Associato per il Settore Scientifico Disciplinare CHIM-08, Chimica Farmaceutica, settore concorsuale 03/D1 – Chimica e Tecnologie Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutico-Alimentari, presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università degli Studi di Milano, via Mangiagalli 25, 20133 Milano.

- 2019** Ha ricevuto giudizio positivo nella valutazione per l'attribuzione delle classi stipendiali relativamente all'anno 2017 (triennio oggetto della valutazione costituito dagli A.A. 2013/2014, 2014/2015 e 2015/2016).
- 2017** Ha ricevuto l'Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore di prima fascia per il settore concorsuale 03-D1 (BANDO D.D. 1532/2016, valida dal 31/03/2017 al 31/03/2023).
- 2013** Professore associato confermato per il settore scientifico-disciplinare CHIM-08 (a decorrere da 01/11/2013).
- 2010** Risultato idoneo in una procedura di valutazione comparativa a n. 1 posto di professore associato, per il settore scientifico-disciplinare CHIM-08, presso la Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Milano, prende servizio presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche "P. Pratesi" (a decorrere da 01/11/2010).
- 2002 - 2010** Ricercatore confermato per il Settore Scientifico Disciplinare CHIM-08 – Chimica Farmaceutica (a decorrere dal 01/04/2002).
- 1999** Vincitore di concorso libero per titoli ed esami a n. 1 posto di ricercatore universitario per il settore scientifico-disciplinare C07X, presso la Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Milano, prende servizio presso l'Istituto di Chimica Farmaceutica e Tossicologica (a decorrere dal 01/04/1999).
- 1996** Abilitazione alla professione del Farmacista.

3. Attività didattica

3.1. Insegnamenti

L'attività didattica, iniziata nel 2000 e proseguita ininterrottamente a tutt'oggi, si è orientata ad argomenti di chimica farmaceutica, analisi farmaceutica e modellistica molecolare nei Corsi di Laurea in Farmacia, Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, Biotecnologie del Farmaco e nella Scuola di Specializzazione in Farmacia Ospedaliera.

3.1.1 Affidamenti

- Per gli A.A. 2000/2001, 2001/2002, 2002/2003, 2003/2004 e 2004/2005, il Consiglio di Facoltà gli ha conferito l'affido dell'insegnamento "Analisi dei Farmaci II" modulo del C.I. "Analisi dei Farmaci Biotecnologici" per il Corso di Laurea in Biotecnologie, di durata quinquennale, ad indirizzo Farmaceutico.
- Per gli A.A. 2003/2004 e 2004/2005, 2005/2006, 2006/2007 e 2007/2008, ha svolto per affidamento l'insegnamento "Analisi dei Farmaci Biotecnologici II" per il Corso di Laurea Specialistica/Magistrale in Biotecnologie del Farmaco.
- Per l'A.A. 2008/2009, il Consiglio di Facoltà gli ha conferito l'affido dell'insegnamento "Analisi dei Farmaci Biotecnologici I" per il Corso di Laurea Magistrale in Biotecnologie del Farmaco.

- Per l'A.A. 2009/2010, ha svolto per affidamento l'insegnamento "Metodiche Analitiche Applicate ai Farmaci Biotecnologici" modulo del C.I. "Aspetti Analitico-Formulativi di Farmaci Biotecnologici" del Corso di Laurea in Biotecnologie del Farmaco.
- Per gli A.A. 2001/2002, 2002/2003, 2003/2004, 2004/2005 il Consiglio di Facoltà gli ha conferito l'affido dell'insegnamento "Impiego di metodologie informatiche nella progettazione dei farmaci", modulo del C.I. "Metodologie avanzate in chimica farmaceutica", nell'ambito dell'indirizzo in Scienza e Sviluppo del Farmaco, per il Corso di Laurea in CTF.
- Negli A.A. 2003/2004, 2004/2005, 2005/2006, 2006/2007 e 2007/2008 gli è stato conferito l'incarico del corso di Complementi di Chimica Farmaceutica per il I anno della Scuola di Specializzazione in Farmacia Ospedaliera.
- Per gli A.A. 2008/2009 e 2009/2010 gli è stato conferito l'incarico del corso di "Basi molecolari dell'azione dei farmaci" per il I anno della Scuola di Specializzazione in Farmacia Ospedaliera.

3.1.2. Compiti didattici e affidamenti per assegnazioni dirette

Nel corso dell'Anno Accademico **2010/2011** ha svolto le seguenti attività didattiche:

BIOTECNOLOGIE DEL FARMACO Aspetti Analitico-Formulativi di Farmaci Biotecnologici (Unità didattica: Metodiche Analitiche Applicate ai Farmaci Biotecnologici)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Laboratorio di Analisi dei medicinali)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Analisi dei medicinali)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA Meccanismi D'azione Dei Farmaci (Basi molecolari dell'azione dei farmaci)

Nel corso dell'Anno Accademico **2011/2012** ha svolto le seguenti attività didattiche:

BIOTECNOLOGIE DEL FARMACO Aspetti Analitico-Formulativi di Farmaci Biotecnologici (Unità didattica: Metodiche Analitiche Applicate ai Farmaci Biotecnologici)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali- (Unità didattica: Laboratorio di Analisi dei medicinali)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Analisi dei medicinali)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA Meccanismi D'azione Dei Farmaci (Basi molecolari dell'azione dei farmaci)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA Terapie Delle Malattie Del SNC (Aspetti chimico-farmaceutici)

Nel corso dell'Anno Accademico **2012/2013** ha svolto le seguenti attività didattiche:

BIOTECNOLOGIE DEL FARMACO Aspetti Analitico-Formulativi di Farmaci Biotecnologici (Unità didattica: Metodiche Analitiche Applicate ai Farmaci Biotecnologici)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Laboratorio di Analisi dei medicinali)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Metodologie avanzate in chimica farmaceutica (Modulo: Metodologie avanzate in chimica farmaceutica Mod. II)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Analisi dei medicinali)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA Meccanismi D'azione Dei Farmaci (Basi molecolari dell'azione dei farmaci)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA Terapie Delle Malattie Del SNC (Aspetti chimico-farmaceutici)

Nel corso dell'Anno Accademico **2013/2014** ha svolto le seguenti attività didattiche:

BIOTECNOLOGIE DEL FARMACO Aspetti Analitico-Formulativi di Farmaci Biotecnologici (Unità didattica: Metodiche Analitiche Applicate ai Farmaci Biotecnologici)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Laboratorio di Analisi dei medicinali)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Metodologie avanzate in chimica farmaceutica (Modulo: Metodologie avanzate in chimica farmaceutica Mod. II)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Analisi dei medicinali)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA Meccanismi D'azione Dei Farmaci (Basi molecolari dell'azione dei farmaci)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA Terapie Delle Malattie Del SNC (Aspetti chimico-farmaceutici)

Nel corso dell'Anno Accademico **2014/2015** ha svolto le seguenti attività didattiche:

BIOTECNOLOGIE DEL FARMACO Bioinformatica strutturale e modellistica molecolare (Metodologie computazionali nello sviluppo biofarmaceutico)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Laboratorio di Analisi dei medicinali)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Analisi dei medicinali)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Metodologie avanzate in chimica farmaceutica (Modulo: Metodologie avanzate in chimica farmaceutica Mod. II)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA TERAPIE DELLE MALATTIE DEL SNC (Aspetti chimico-farmaceutici I)

Nel corso dell'Anno Accademico **2015/2016** ha svolto le seguenti attività didattiche:

BIOTECNOLOGIE DEL FARMACO Bioinformatica strutturale e modellistica molecolare- (Metodologie computazionali nello sviluppo biofarmaceutico)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Analisi dei medicinali)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Metodologie avanzate in chimica farmaceutica (Modulo: Metodologie avanzate in chimica farmaceutica Mod. II)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Laboratorio di Analisi dei medicinali)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA TERAPIE DELLE MALATTIE DEL SNC (Aspetti chimico-farmaceutici I)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA MECCANISMI D'AZIONE DEI FARMACI (Basi molecolari dell'azione dei farmaci)

Nel corso dell'Anno Accademico **2016/2017** ha svolto le seguenti attività didattiche:

BIOTECNOLOGIE DEL FARMACO Bioinformatica strutturale e modellistica molecolare (Metodologie computazionali nello sviluppo biofarmaceutico)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Analisi dei medicinali)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Metodologie avanzate in chimica farmaceutica (Modulo: Metodologie avanzate in chimica farmaceutica Mod. II)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Laboratorio di Analisi dei medicinali)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA TERAPIE DELLE MALATTIE DEL SNC (Aspetti chimico-farmaceutici I)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA MECCANISMI D'AZIONE DEI FARMACI (Basi molecolari dell'azione dei farmaci)

Nel corso dell'Anno Accademico **2017/2018** ha svolto le seguenti attività didattiche:

BIOTECNOLOGIE DEL FARMACO Bioinformatica strutturale e modellistica molecolare- (Metodologie computazionali nello sviluppo biofarmaceutico)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Analisi dei medicinali)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Metodologie avanzate in chimica farmaceutica (Modulo: Metodologie avanzate in chimica farmaceutica Mod. II)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Analisi dei medicinali e Lab. di Analisi dei medicinali (Unità didattica: Laboratorio di Analisi dei medicinali)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA TERAPIE DELLE MALATTIE DEL SNC (Aspetti chimico-farmaceutici I)

SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA MECCANISMI D'AZIONE DEI FARMACI (Basi molecolari dell'azione dei farmaci)

Nel corso dell'Anno Accademico **2018/2019** ha svolto le seguenti attività didattiche:

BIOTECNOLOGIE DEL FARMACO Bioinformatica strutturale e modellistica molecolare- (Metodologie computazionali nello sviluppo biofarmaceutico)

CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE Metodologie avanzate in chimica farmaceutica (Modulo: Metodologie avanzate in chimica farmaceutica Mod. II)

FARMACIA Chimica farmaceutica e tossicologica I, Modulo Unico.

3.2 Attività didattica integrativa e di servizio agli studenti

3.2.1 Assistenza allo svolgimento di tesi (sperimentali e compilative)

Il Prof. Giulio Vistoli è stato Relatore di 22 Tesi sperimentali per i Corsi di Laurea in Biotecnologia, Biotecnologia del Farmaco e Chimica e Tecnologia Farmaceutiche. E' stato inoltre correlatore di 16 Tesi sperimentali per i Corsi di Laurea in Farmacia, Biotecnologia, Biotecnologia del Farmaco, Biotecnologie Mediche e Chimica e Tecnologia Farmaceutiche. E' stato infine Relatore di più di 70 Tesi compilative per il Corso di Laurea in Farmacia.

3.2.2. Tutorato di dottorandi di ricerca

- Tutor della Dott.ssa Ilaria Bettinelli, titolo della Tesi "Modellazione in silico dei recettori metabotropici del glutammato e analisi delle loro capacità interattive mediante docking molecolare", Dottorato di Ricerca in Chimica del Farmaco XXII ciclo;
- Tutor del Dott. Matteo Lo Monte, titolo della Tesi "In silico screening of Taste Receptors: an integrate modeling approach", Dottorato di Ricerca in Chimica del Farmaco XXVII ciclo;
- Tutor della Dott.ssa Angelica Mazzolari, titolo della Tesi "In silico approaches in drug design and development: applications to rational ligand design and metabolism prediction", Dottorato di Ricerca in Chimica del Farmaco XXVIII ciclo.

3.3 Attività seminariale

1/06/2000 Seminario dal titolo "Metodologie computazionali nella correlazione fra attività biologica e proprietà chimico-fisiche", tenuto presso Istituto di Chimica Farmaceutica e Tossicologica, Milano.

11/07/2002 Seminario dal titolo "Molecular docking and QSAR analysis: a combined approach applied to Alpha1a-AR antagonists", tenuto presso Institut de Chimie Thérapeutique, Université de Lausanne, Lausanne, Svizzera.

5/12/2003 Seminario dal titolo "Proprietà chimico-fisiche e flessibilità molecolare: nuovo approccio nella progettazione dei farmaci", tenuto presso Dipartimento Farmaco-Chimico, Università di Messina, Messina.

29/11/04 Seminario dal titolo "Predizione della selettività con nuovi approcci di QSAR dinamico", tenuto presso Istituto di Ricerche Farmacologiche Mario Negri, Milano.

17/06/05 Seminario dal titolo "Studio dell'interazione proteina-ligando con simulazioni di docking e dinamica molecolare", tenuto nell'ambito della giornata di studio "RECEPTORI: dal silicio al laboratorio", Dipartimento di Scienze Farmacologiche, Milano.

28/02/06 Seminario dal titolo "Approcci computazionali sulla carnosinasi", tenuto nell'ambito della giornata di studio "Metodologie avanzate in analisi farmaceutica" Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Bologna.

29/05/2009 Seminario dal titolo "Modeling of transmembrane proteins: new trends and opportunities", tenuto presso il Department of Medicinal Chemistry and Pharmacognosy University of Illinois at Chicago (USA).

16/5/2011 Seminario per il dottorato in Chimica del farmaco dell'Università degli studi di Milano dal titolo "Computational approach to predict drug metabolites" nell'ambito di un corso dal titolo "DRUG METABOLISM IN MEDICINAL CHEMISTRY" di cui il Prof. Vistoli era responsabile.

17/12/2012 Seminario dal titolo "ADME/tox profiling and delivery optimization: fertile avenues for molecular modeling", tenutosi presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Università degli Studi di Perugia.

15/04/2013 Seminario dal titolo "Rational design of carnosine derivatives as potent and selective inhibitors of protein carbonylation", tenuto presso il Dipartimento di Scienze del Farmaco e dei Prodotti per la Salute, Università di Messina.

10/4/2014 Seminario per il "Dottorato di ricerca scienze biomolecolari farmaceutiche e mediche-scienze chimiche e molecolari" dell'Università degli studi di Bari "Aldo Moro" dal titolo Approcci computazionali nella predizione del metabolismo di xenobiotici.

19/07/2014 Seminario dal titolo "Polymer behaviour during glass transition as assessed by MD simulations" nell'ambito della giornata di studio "On Glass Transition in Amorphous Pharmaceutical Materials", tenutasi presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Università degli Studi di Perugia.

15/5/2015 Seminario per il dottorato in Scienze Farmaceutiche dell'Università degli Studi di Milano dal titolo "Computational approaches to predict drug metabolism and metabolites", nell'ambito del corso dal titolo "Drug metabolism and ADMET".

7/7/2017 Seminario dal titolo "From molecular docking to virtual screening approaches: an in silico journey poking around the recognition event", tenuto presso l'Istituto di Biochimica delle Proteine, Consiglio Nazionale delle Ricerche, Napoli.

27/6/2019 Seminario dal titolo "MetaQSAR: a manually curated metabolic database showing fruitful applications in ADME/Tox prediction", nell'ambito del workshop dal titolo "Interdisciplinary Aspects of Biomolecular Modelling", tenutosi presso l'Università degli Studi di Milano.

4. Attività di ricerca

4.1 Breve descrizione delle 20 pubblicazioni selezionate

L'attività scientifica del Prof. Giulio Vistoli si è rivolta a diverse tematiche, che sono state affrontate con l'utilizzo di metodologie computazionali, utilizzando di volta in volta l'approccio più opportuno e sviluppando nuovi strumenti informatici in funzione degli obiettivi prefissati. L'intera attività scientifica del Prof. Vistoli ed in particolare le 20 pubblicazioni selezionate per la presente procedura di valutazione consentono di enucleare alcune principali tematiche di ricerca che possono essere così schematizzate

1. Ricerche di carattere metodologico ed applicativo relative alla modellazione di proteine e all'analisi delle loro capacità interattive mediante studi di docking, virtual screening e simulazioni di dinamica molecolare;
2. Ricerche riguardanti lo sviluppo del concetto di spazio di proprietà per l'analisi del profilo dinamico di proprietà chimico-fisiche con particolare riguardo allo studio della lipofilia molecolare e alla predizione del metabolismo dei farmaci e degli xenobiotici;
3. Ricerche concernenti la progettazione razionale di derivati della carnosina quali agenti detossificanti potenti e selettivi di aldeidi citotossiche.

In particolare, tutte le 20 pubblicazioni selezionate sono state pubblicate su riviste internazionali indicizzate con un valore di IF (riferito all'anno 2018) che varia da 3.25 a 14.695 con una media di 6.54. Nelle 20 pubblicazioni, il Prof. Giulio Vistoli è corrisponding author in 13 casi, è primo o ultimo nome in altri 4 casi ed è secondo o penultimo in 2 casi.

TEMATICA 1: Ricerche di carattere metodologico ed applicativo relative alla modellazione di proteine e all'analisi delle loro capacità interattive mediante studi di docking, virtual screening e simulazioni di dinamica molecolare

Le pubblicazioni selezionate per tale tematica e di carattere sostanzialmente applicativo hanno riguardato target proteici la cui struttura, non ancora risolta sperimentalmente è stata modellata con tecniche computazionali basate sull'omologia. In alcuni studi, tale modellazione ha contemplato metodiche consolidate, mentre altri studi si sono avvalsi di approcci innovativi principalmente basati su una modellazione frammentale. In dettaglio, **nella nota 8**, tecniche di modellazione per omologia convenzionali hanno consentito di modellare la struttura 3D dell'enzima carnosinasi serica umana (si veda anche tematica 3). La struttura enzimatica ottenuta è stata poi impiegata per valutare le capacità interattive di peptidi istidinici derivati della carnosina e per studiare l'effetto di tipo allosterico indotto dallo ione citrato sull'attività catalitica dell'enzima tramite simulazioni di dinamica molecolare. Similmente nella **nota 11**, la struttura della seconda subunità catalitica dell'enzima umano HDAC6 è stata modellata utilizzando come riferimento (*template*) la struttura risolta di altre isoforme di HDAC. Il confronto di tale struttura con quelle delle altre isoforme (in particolare HDAC1) ha consentito il disegno

razionale di inibitori selettivi per l'isoforma HDAC6. Infine nella **nota 14**, le strutture appositamente risolte di Acetylcholine Binding Protein (AChBP) da *Capitella teleta* sono state utilizzate per sviluppare modelli ottimizzati della porzione extracellulare del recettore nicotico $\alpha 4\beta 2$ umano che sono stati poi impiegati nella progettazione razionale di nuovi ligandi ciclopropanici strutturalmente riferibili alla Sazetidina.

Per quanto concerne gli studi basati su metodiche innovative per la modellazione della struttura proteica, la **nota 7** riporta la modellazione del recettore umano per la grelina (hGHS-R1a) utilizzando un approccio frammentale nel quale il recettore viene diviso in segmenti strutturali e la struttura di ogni segmento viene predetta separatamente sfruttando l'omologia locale. Tale approccio è risultato particolarmente utile nella modellazione dei recettori accoppiati alle proteine G (GPCR) per considerare opportunamente le peculiarità strutturali di ogni recettore (e dei suoi possibili stati conformazionali) evitando che tutti i modelli ottenuti si conformassero eccessivamente alla struttura dei pochi recettori risolti sperimentalmente. Benché fosse stato sviluppato principalmente per i recettori GPCR, tale approccio frammentale ha fornito risultati soddisfacenti anche per modellare la struttura di canali ionici come nel caso del recettore-canale umano TRPM8 (**nota 10**).

Per quanto riguarda gli aspetti metodologici, la **nota 1** descrive un nuovo algoritmo di docking rigido basato sulla combinazione di ricerca stocastica e cicli di minimizzazione (*BioDock*). Tale metodica è stata quindi impiegata per studi di docking di inibitori naturali con l'enzima farnesil transferasi. La **nota 1** riporta anche la definizione formale del descrittore *lipolo* capace di valutare la distribuzione delle porzioni idrofiliche e di quelle idrofobiche in una molecola. Nella **nota 12**, viene sviluppato un metodo (*GriDock*) per effettuate simulazioni di docking utilizzando AutoDock in modo parallelo. Tale programma è stato quindi utilizzato per effettuare simulazioni di docking sull'enzima umano carbossilesterasi 2 (hCES2) e i risultati ottenuti hanno consentito di sviluppare modelli structure-based predittivi per il metabolismo idrolitico di esteri ed amidi di interesse farmaceutico. Questa pubblicazione rappresenta uno dei primi esempi di studi rivolti alla predizione del metabolismo di farmaci e xenobiotici, tematica che, in costante collaborazione con il Prof. Bernard Testa di Losanna, avrà un ruolo di primo piano nella recente produzione scientifica del candidato.

Insieme allo sviluppo di uno strumento per il rescoring automatizzato dei risultati del docking (*Rescore+*), la **nota 17** è stata selezionata perché rappresenta il punto di incontro tra le tematiche 1 e 2. Infatti, la definizione dello spazio di binding si basa sugli stessi concetti che avevano già portato allo sviluppo del concetto di spazio di proprietà e che vengono ora applicati ai risultati di simulazioni di docking anziché all'analisi di proprietà chimico-fisiche. In particolare, tale studio propone di considerare simultaneamente più pose prodotte dal docking, utilizzando descrittori quali media, range e sensibilità (si veda tematica 2) per trattare matematicamente le funzioni di score di tali pose selezionate. Lo spazio di binding viene quindi testato in uno studio di docking sull'enzima butirrilcolinesterasi allo scopo di sviluppare modelli predittivi del metabolismo idrolitico catalizzato da tale enzima (in linea con la **nota 12**). I risultati ottenuti evidenziano chiaramente come l'introduzione dei descrittori dello spazio di binding consentano di sviluppare modelli predittivi migliori rispetto all'utilizzo convenzionale di un'unica posa e ciò suggerisce come il concetto di spazio di binding possa essere un valido strumento sia per considerare la possibilità di *binding mode* multipli sia, più semplicemente, per simulare la flessibilità che un ligando mantiene durante il processo di riconoscimento. Infine e per quanto riguarda gli studi metodologici riguardanti il virtual screening, la **nota 20**, pubblicata nello Special Issue "New Avenues in Molecular Docking for Drug Design" di cui il candidato è editor, propone l'utilizzo di funzioni di consensus basate su combinazioni lineari di funzioni di score sviluppate ottimizzando il corrispondente fattore di arricchimento. Applicata ai dataset *DUD*, tale approccio fornisce risultati del tutto soddisfacenti anche in confronto con metodiche analoghe utilizzate nel virtual screening.

Sebbene non direttamente collegato agli studi di docking, la **nota 3** descrive il programma VEGA. Tale programma nasce come convertitore di formati molecolari e con il tempo, le sue finalità sono notevolmente accresciute, soprattutto con l'acquisizione di un'interfaccia grafica, che consente di visualizzare e manipolare in modo interattivo complesse strutture molecolari in 3D. Attualmente VEGA rappresenta un elevato standard qualitativo tra i programmi gratuiti di grafica molecolare e con le sue molteplici funzioni rappresenta un versatile strumento nella progettazione dei farmaci assistita al computer.

TEMATICA 2: Ricerche riguardanti lo sviluppo del concetto di spazio di proprietà per l'analisi del profilo dinamico di proprietà chimico-fisiche con particolare riguardo allo studio della lipofilia molecolare e alla predizione del metabolismo dei farmaci e xenobiotici

Comune denominatore di questa seconda tematica è costituito dal fatto che tutte le ricerche riportate sono il frutto dell'estesa collaborazione che il candidato ha con il Prof. B. Testa di Losanna. In particolare, tali ricerche si sono inizialmente focalizzate sullo studio di come il profilo conformazionale di una molecola possa influenzare le proprietà chimico-fisiche dipendenti dalla conformazione, quali ad esempio la lipofilia molecolare, calcolata con l'approccio MLP, o in genere tutte le proprietà calcolate con i campi molecolari 3D. Tali studi hanno evidenziato come una molecola flessibile non possa essere descritta da un unico valore di proprietà, ma possa assumere una serie di valori (uno per ogni conformazione significativa), tutti rappresentativi di quella molecola all'equilibrio. Questa serie di valori possibili costituisce il cosiddetto spazio di proprietà per una data molecola flessibile. Lo spazio di proprietà potrà essere definito, in primis, dalla media ponderata dei valori che lo compongono. Tuttavia tale parametro, benché utile per definire le proprietà globali di una molecola, non fornisce nessuna informazione sul suo profilo dinamico. Per questo lo spazio di proprietà dovrà anche comprendere parametri che codifichino la dinamicità di tale spazio di proprietà come il range dei valori che lo costituiscono, che ne definisce l'ampiezza, e un parametro innovativo che definisce la capacità di una molecola di variare le proprietà chimico-fisiche in funzione della variabilità strutturale. Infatti, l'analisi dello spazio di proprietà su ampi database di molecole ha evidenziato l'esistenza di molecole in grado di esercitare significative variazioni delle proprietà con piccole modifiche conformazionali (definite molecole sensibili), e, al contrario, molecole incapaci di modificare tali proprietà neppure con ampie transizioni conformazionali (molecole insensibili). Non a caso, tale nuovo parametro è stato definito "sensibilità molecolare" (*molecular sensitivity*) ed è il rapporto tra la variabilità dello spazio di proprietà e la flessibilità dello spazio conformazionale. In dettaglio, il concetto di spazio di proprietà (e dei parametri che ne derivano) è stato inizialmente sviluppato considerando un'unica molecola di rilevante interesse biologico, l'acetilcolina, simulata in diversi sistemi isotropi ed anisotropi (**note 2, 4 e 6**). In seguito tale concetto è stato applicato a set di molecole e ha fornito risultati molto promettenti nella predizione sia della selettività per il recettore α_1 (**nota 5**) sia di rilevanti parametri farmacocinetici (**nota 9**).

Muovendo dall'interesse crescente verso modelli predittivi per i processi farmacocinetici, una fase più recente della collaborazione con il Prof. Testa si è quindi concentrata sullo sviluppo di modelli predittivi del metabolismo dei farmaci. Inizialmente le ricerche si sono rivolte allo sviluppo di modelli locali structure-based per la predizione del metabolismo idrolitico (si veda ad esempio **nota 12**, tematica 1) per poi assumere un carattere più generale volto allo sviluppo di un database di reazioni metaboliche da utilizzarsi come fonte di learning sets accurati con cui generare nuovi modelli predittivi. Tale progetto nasce dall'osservazione che la maggior parte dei database disponibili riguardanti il metabolismo dei farmaci è stato compilato in modo automatizzato interrogando altre risorse on line (quali *PubChem* o *DrugBank*). Pertanto, tali database presentano un grado di accuratezza dei dati contenuti non eccezionale che in teoria tendono a compensare con le notevoli dimensioni dei database stessi. Tuttavia si deve notare come lo sviluppo di modelli predittivi quantitativi sia structure- sia ligand-based non richieda dataset di dimensioni sterminate, mentre anche un numero limitato di dati inesatti può minare le performances globali dei modelli sviluppati. Su queste premesse si è quindi iniziata una meta-analisi curata manualmente della letteratura scientifica specializzata degli ultimi anni che ha portato alla compilazione di un database di reazioni metaboliche (*MetaQSAR*) caratterizzato da elevati standard di accuratezza dei dati. In particolare, nella **nota 13** questo database è stato sfruttato in modo sostanzialmente qualitativo per valutare il ruolo specifico delle varie reazioni metaboliche, mentre la **nota 18** presenta una descrizione più puntuale di tale database, dell'interfaccia grafica implementata in VEGA e sviluppata appositamente per gestirlo. Descrive inoltre una nuova classificazione delle reazioni metaboliche, che vengono qui suddivise in 3 classi principali, 28 classi e 101 sottoclassi.

TEMATICA 3: Ricerche concernenti la progettazione razionale di derivati della carnosina quali agenti detossificanti potenti e selettivi di aldeidi citotossiche

In collaborazione con il gruppo di ricerca coordinato dai Proff. Carini e Aldini, il Prof. Giulio Vistoli si è lungamente occupato dello studio del dipeptide endogeno carnosina (β -Ala-His) e dei suoi derivati quali agenti detossificanti in grado di reagire covalentemente con aldeidi citotossiche α,β insature formando addotti non più reattivi e prontamente eliminabili. In dettaglio, gli studi computazionali hanno riguardato sia la predizione del profilo farmacocinetico di tali peptidi come nel già descritto studio riguardante la carnosinasi serica umana che è il principale enzima responsabile dell'idrolisi della carnosina a livello plasmatico (**nota 8**) sia la razionalizzazione della diversa reattività della carnosina e dei suoi derivati nei confronti dell'aldeidi reattive utilizzando per lo più approcci quantomeccanici (**nota 16**). Per quanto concerne gli studi focalizzati su nuovi derivati della carnosina, sono state qui selezionate la **nota 15** che descrive un'analisi sistematica di tutti i possibili dipeptidi istidinici nei quali la posizione N-terminale è occupata da un residuo proteino-genico e la **nota 19** che riporta la progettazione razionale e l'attività farmacologica del carnosinolo, derivato di sintesi caratterizzato da un migliorato profilo farmacocinetico ed un'aumentata attività detossificante.

4.2 Pubblicazioni scientifiche

4.2.1 Indici bibliometrici

Globalmente la produzione scientifica del Prof. Giulio Vistoli si è concretizzata in 158 pubblicazioni scientifiche *in extenso* su riviste, 10 capitoli di libro e 6 brevetti.

Il Prof. Giulio Vistoli raggiunge i seguenti indici bibliometrici (dati aggiornati a 1 luglio 2019):

Scopus

Pubblicazioni = 163

Citazioni = 3961

H-index = 28

Web of Science

Pubblicazioni = 165

Citazioni = 3706

H-index = 27

In particolare due pubblicazioni (n. 58 e 85 al punto 4.2.2) hanno ricevuto le citazioni necessarie per entrare nel novero delle "highly cited paper", ossia nel top 1% nel campo della chimica (n. 58) e della biologia e biochimica (n. 85) secondo i dati di Essential Science IndicatorsSM

Sulla base di tali indici, il Prof. Giulio Vistoli soddisfa i valori soglia per commissari del SC 03/D1– Chimica e Tecnologie Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutico-Alimentari (D.M. 589/2018).

4.2.2 Articoli in extenso su riviste

1. Pedretti, A., Villa, A.M., Villa, L., Vistoli, G. Interactions of some PGHS-2 selective inhibitors with the PGHS-1: An automated docking study by BioDock (1997) *Farmaco*, 52 (6-7), 487-491.
2. Vistoli, G., Pedretti, A., Villa, A.M., Villa, L., Holzgrabe, U., Cambareri, A. Molecular hydrophobicity index: Application to a series of allosteric modulators of the M2 receptors (1999) *Analisis*, 27 (1), 32-41.

3. Pedretti, A., Vistoli, G., Villa, A.M., Villa, L., Modelling of the interactions of some inhibitors with the farnesyl protein transferase by BioDock - Stochastic approach to automated docking of ligands to the biomacromolecules (1999) *Internet Journal of Chemistry*, Vol. 2, Art. 8 (04/03/1999).
4. Pedretti, A., Villa, A.M., Villa, L., Vistoli, G. Lipophilicity profile of WB-4101 analogues using the ILM approach (1999) *Internet Journal of Chemistry*, Vol. 3, Art. 13 (30/06/2000).
5. De Amici, M., Conti, P., Vistoli, G., Carrea, G., Ottolina, G., De Micheli, C. Synthesis and structure-activity relationships in a set of new antimuscarinic agents (2001) *Medicinal Chemistry Research*, 10 (9), 615-633.
6. Pedretti, A., Villa, L., Vistoli, G. VEGA: A versatile program to convert, handle and visualize molecular structure on Windows-based PCs (2002) *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 21 (1), 47-49.
7. Pedretti, A., Villa, L., Vistoli, G. Modeling of binding modes and inhibition mechanism of some natural ligands of farnesyl transferase using molecular docking (2002) *Journal of Medicinal Chemistry*, 45 (7), 1460-1465.
8. Vistoli, G., Pedretti, A., Villa, L., Testa, B. The solute-solvent system: Solvent constraints on the conformational dynamics of acetylcholine (2002) *Journal of the American Chemical Society*, 124 (25), 7472-7480.
9. Conti, P., De Amici, M., Roda, G., Vistoli, G., Stensbøl, T.B., Bräuner-Osborne, H., Madsen, U., Toma, L., De Micheli, C. Design of novel conformationally restricted analogues of glutamic acid (2003) *Tetrahedron*, 59 (9), 1443-1452.
10. Pedretti, A., Villa, L., Vistoli, G. Atom-type description language: A universal language to recognize atom types implemented in the VEGA program (2003) *Theoretical Chemistry Accounts*, 109 (4), 229-232.
11. De Luca, L., Pedretti, A., Vistoli, G., Barreca, M.L., Villa, L., Monforte, P., Chimirri, A. Analysis of the full-length integrase-DNA complex by a modified approach for DNA docking (2003) *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 310 (4), 1083-1088.
12. Pedretti, A., Villa, L., Vistoli, G. VEGA - An open platform to develop chemo-bio-informatics applications, using plug-in architecture and script programming (2004) *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 18 (3), 167-173.
13. Pedretti, A., Silva, M.E., Villa, L., Vistoli, G. Binding site analysis of full-length α 1a adrenergic receptor using homology modeling and molecular docking (2004) *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 319 (2), 493-500.
14. Bolchi, C., Catalano, P., Fumagalli, L., Gobbi, M., Pallavicini, M., Pedretti, A., Villa, L., Vistoli, G., Valoti, E. Structure-affinity studies for a novel series of homochiral naphtho and tetrahydronaphtho analogues of α 1 antagonist WB-4101(2004) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 12 (18), 4937-4951.
15. Vistoli, G., Pedretti, A., Villa, L., Testa, B. Solvent constraints on the property space of acetylcholine. I. Isotropic solvents (2005) *Journal of Medicinal Chemistry*, 48 (6), 1759-1767.
16. Fumagalli, L., Bolchi, C., Colleoni, S., Gobbi, M., Moroni, B., Pallavicini, M., Pedretti, A., Villa, L., Vistoli, G., Valoti, E. QSAR study for a novel series of ortho monosubstituted phenoxy analogues of α 1-adrenoceptor antagonist WB4101 (2005) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 13 (7), 2547-2559.
17. Aldini, G., Dalle-Donne, I., Vistoli, G., Facino, R.M., Carini, M. Covalent modification of actin by 4-hydroxy-trans-2-nonenal (HNE): LC-ESI-MS/MS evidence for Cys374 Michael adduction (2005) *Journal of Mass Spectrometry*, 40 (7), 946-954.
18. Vistoli, G., Pedretti, A., Villa, L., Testa, B. Range and sensitivity as descriptors of molecular property spaces in dynamic QSAR analyses (2005) *Journal of Medicinal Chemistry*, 48 (15), 4947-4952.
19. Vistoli, G., Pedretti, A., Villa, L., Testa, B. Solvent constraints on the property space of acetylcholine. 2. Ordered media (2005) *Journal of Medicinal Chemistry*, 48 (22), 6926-6935.
20. De Luca, L., Vistoli, G., Pedretti, A., Barreca, M.L., Chimirri, A. Molecular dynamics studies of the full-length integrase-DNA complex (2005) *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 336 (4), 1010-1016.
21. Testa, B., Vistoli, G., Pedretti, A. Musings on ADME predictions and Structure - Activity Relations (2005) *Chemistry and Biodiversity*, 2 (11), 1411-1427.

22. Pedretti, A., Villa, M., Pallavicini, M., Valoti, E., Vistoli, G. Construction of human ghrelin receptor (hGHS-R1a) model using a fragmental prediction approach and validation through docking analysis (2006) *Journal of Medicinal Chemistry*, 49 (11), 3077-3085.
23. Vistoli, G., Pedretti, A., Cattaneo, M., Aldini, G., Testa, B. Homology modeling of human serum carnosinase, a potential medicinal target, and MD simulations of its allosteric activation by citrate (2006) *Journal of Medicinal Chemistry*, 49 (11), 3269-3277.
24. Pedretti, A., Vistoli, G., Marconi, C., Testa, B. Muscarinic receptors: A comparative analysis of structural features and binding modes through homology modelling and molecular docking (2006) *Chemistry and Biodiversity*, 3 (5), 481-501.
25. Pallavicini, M., Fumagalli, L., Gobbi, M., Bolchi, C., Colleoni, S., Moroni, B., Pedretti, A., Rusconi, C., Vistoli, G., Valoti, E. QSAR study for a novel series of ortho disubstituted phenoxy analogues of α 1-adrenoceptor antagonist WB4101 (2006) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 41 (9), 1025-1040.
26. Pallavicini, M., Moroni, B., Bolchi, C., Cilia, A., Clementi, F., Fumagalli, L., Gotti, C., Meneghetti, F., Riganti, L., Vistoli, G., Valoti, E. Synthesis and α 4 β 2 nicotinic affinity of unichiral 5-(2-pyrrolidinyl)oxazolidinones and 2-(2-pyrrolidinyl)benzodioxanes (2006) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 16 (21), 5610-5615.
27. Dalle-Donne, I., Carini, M., Vistoli, G., Gamberoni, L., Giustarini, D., Colombo, R., Maffei Facino, R., Rossi, R., Milzani, A., Aldini, G. Actin Cys374 as a nucleophilic target of α,β -unsaturated aldehydes (2007) *Free Radical Biology and Medicine*, 42 (5), 583-598.
28. Aldini, G., Carini, M., Vistoli, G., Shibata, T., Kusano, Y., Gamberoni, L., Dalle-Donne, I., Milzani, A., Uchida, K. Identification of actin as a 15-deoxy- Δ 12,14-prostaglandin J2 target in neuroblastoma cells: Mass spectrometric, computational, and functional approaches to investigate the effect on cytoskeletal derangement (2007) *Biochemistry*, 46 (10), 2707-2718.
29. Pedretti, A., Vistoli, G. Modeling of human ghrelin receptor (hGHS-R1a) in its close state and validation by molecular docking (2007) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 15 (8), 3054-3064.
30. Cilurzo, F., Selmin, F., Vistoli, G., Minghetti, P., Montanari, L. Binary polymeric blends to microencapsulate nitroflurbiprofen: Physicochemical and in silico studies (2007) *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 31 (3-4), 202-210.
31. Vistoli, G., Pedretti, A., Testa, B., Matucci, R. The conformational and property space of acetylcholine bound to muscarinic receptors: An entropy component accounts for the subtype selectivity of acetylcholine (2007) *Archives of Biochemistry and Biophysics*, 464 (1), 112-121.
32. Bolchi, C., Pallavicini, M., Rusconi, C., Diomede, L., Ferri, N., Corsini, A., Fumagalli, L., Pedretti, A., Vistoli, G., Valoti, E. Peptidomimetic inhibitors of farnesyltransferase with high in vitro activity and significant cellular potency (2007) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 17 (22), 6192-6196.
33. Espinoza-Fonseca, L.M., Pedretti, A., Vistoli, G. Structure and dynamics of the full-length M1 muscarinic acetylcholine receptor studied by molecular dynamics simulations (2008) *Archives of Biochemistry and Biophysics*, 469 (1), 142-150.
34. Pedretti, A., De Luca, L., Sciarrillo, C., Vistoli, G. Fragmental modeling of human glutamate transporter EAAT1 and analysis of its binding modes by docking and pharmacophore mapping (2008) *ChemMedChem*, 3 (1), 79-90.
35. Vistoli, G., Pedretti, A., Dei, S., Scapecchi, S., Marconi, C., Romanelli, M.N. Docking analyses on human muscarinic receptors: Unveiling the subtypes peculiarities in agonists binding (2008) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 16 (6), 3049-3058.
36. Vistoli, G., Pedretti, A., Testa, B. Assessing drug-likeness - what are we missing? (2008) *Drug Discovery Today*, 13 (7-8), 285-294.
37. Aldini, G., Vistoli, G., Regazzoni, L., Gamberoni, L., Facino, R.M., Yamaguchi, S., Uchida, K., Carini, M. Albumin is the main nucleophilic target of human plasma: A protective role against pro-atherogenic electrophilic reactive carbonyl species? (2008) *Chemical Research in Toxicology*, 21 (4), 824-835.
38. Pedretti, A., Marconi, C., Bolchi, C., Fumagalli, L., Ferrara, R., Pallavicini, M., Valoti, E., Vistoli, G. Modelling of full-length human α 4 β 2 nicotinic receptor by fragmental approach and analysis of its binding modes (2008) *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 369 (2), 648-653.

39. Pedretti, A., Bocci, E., Maggi, R., Vistoli, G. Homology modelling of human DHCR24 (seladin-1) and analysis of its binding properties through molecular docking and dynamics simulations (2008) *Steroids*, 73 (7), 708-719.
40. Pedretti, A., De Luca, L., Marconi, C., Negrisoli, G., Aldini, G., Vistoli, G. Modeling of the intestinal peptide transporter hPepT1 and analysis of its transport capacities by docking and pharmacophore mapping (2008) *ChemMedChem*, 3 (12), 1913-1921.
41. Pallavicini, M., Bolchi, C., Binda, M., Cilia, A., Clementi, F., Ferrara, R., Fumagalli, L., Gotti, C., Moretti, M., Pedretti, A., Vistoli, G., Valoti, E. 5-(2-Pyrrolidinyl)oxazolidinones and 2-(2-pyrrolidinyl)benzodioxanes: Synthesis of all the stereoisomers and $\alpha_4\beta_2$ nicotinic affinity (2009) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 19 (3), 854-859.
42. Pedretti, A., Marconi, C., Bettinelli, I., Vistoli, G. Comparative modeling of the quaternary structure for the human TRPM8 channel and analysis of its binding features (2009) *Biochimica et Biophysica Acta - Biomembranes*, 1788 (5), 973-982.
43. Beretta, G., Vistoli, G., Caneva, E., Anselmi, C., Facino, R.M. Structure elucidation and NMR assignments of two new pyrrolidinyl quinoline alkaloids from chestnut honey (2009) *Magnetic Resonance in Chemistry*, 47 (5), 456-459.
44. Vistoli, G., Pedretti, A., Alessandrini, L., Casati, S., Ciuffreda, P., Meroni, G., Santaniello, E. Enhanced activity or resistance of adenosine derivatives towards adenosine deaminase-catalyzed deamination: Influence of ribose modifications (2009) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 19 (10), 2877-2879.
45. Dalle-Donne, I., Carini, M., Orioli, M., Vistoli, G., Regazzoni, L., Colombo, G., Rossi, R., Milzani, A., Aldini, G. Protein carbonylation: 2,4-dinitrophenylhydrazine reacts with both aldehydes/ketones and sulfenic acids (2009) *Free Radical Biology and Medicine*, 46 (10), 1411-1419.
46. Vistoli, G., Orioli, M., Pedretti, A., Regazzoni, L., Canevotti, R., Negrisoli, G., Carini, M., Aldini, G. Design, synthesis, and evaluation of carnosine derivatives as selective and efficient sequestering agents of cytotoxic reactive carbonyl species (2009) *ChemMedChem*, 4 (6), 967-975.
47. Vistoli, G., Pedretti, A., Testa, B. Partition coefficient and molecular flexibility: The concept of lipophilicity space (2009) *Chemistry and Biodiversity*, 6 (8), 1152-1169.
48. Testa, B., Vistoli, G., Pedretti, A., Bojarski, A.J. Atomic diversity, molecular diversity, and chemical diversity: The concept of chemodiversity (2009) *Chemistry and Biodiversity*, 6 (8), 1145-1150.
49. Butler, K.V., He, R., McLaughlin, K., Vistoli, G., Langley, B., Kozikowski, A.P. Stereoselective HDAC inhibition from cysteine-derived zinc-binding groups (2009) *ChemMedChem*, 4 (8), 1292-1301.
50. Santaniello, E., Casati, S., Ciuffreda, P., Meroni, G., Pedretti, A., Vistoli, G. A molecular modelling approach to rationalize the stereochemical outcome of the *Burkholderia cepacia* lipase-catalyzed transesterification of aromatic primary alcohols with vinyl esters with different chain lengths in chloroform (2009) *Tetrahedron Asymmetry*, 20 (16), 1833-1836.
51. Vistoli, G., Pedretti, A., Mazzolari, A., Bolchi, C., Testa, B. Influence of ionization state on the activation of temocapril by hCES1: A molecular-dynamics study (2009) *Chemistry and Biodiversity*, 6 (11), 2092-2100.
52. Vistoli, G., Pedretti, A., Mazzolari, A., Testa, B. In silico prediction of human carboxylesterase-1 (hCES1) metabolism combining docking analyses and MD simulations (2010) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 18 (1), 320-329.
53. Yamaguchi, S., Aldini, G., Ito, S., Morishita, N., Shibata, T., Vistoli, G., Carini, M., Uchida, K. Δ 12-Prostaglandin J2 as a product and ligand of human serum albumin: Formation of an unusual covalent adduct at His146 (2010) *Journal of the American Chemical Society*, 132 (2), 824-832.
54. Aldini, G., Vistoli, G., Regazzoni, L., Benfatto, M.C., Bettinelli, I., Carini, M. Edaravone inhibits protein carbonylation by a direct carbonyl-scavenging mechanism: Focus on reactivity, selectivity, and reaction mechanisms (2010) *Antioxidants and Redox Signaling*, 12 (3), 381-392.
55. Cilurzo, F., Gennari, C.G.M., Selmin, F., Vistoli, G. Effects of metal ions on entero-soluble poly(methacrylic acid-methyl methacrylate) coating: A combined analysis by ATR-FTIR spectroscopy and computational approaches (2010) *Molecular Pharmaceutics*, 7 (2), 421-430.
56. Panusa, A., Aldini, G., Orioli, M., Vistoli, G., Rossoni, G., Carini, M. A sensitive and specific precursor ion scanning approach in liquid chromatography/electrospray ionization tandem mass

spectrometry to detect methylprednisolone acetate and its metabolites in rat urine (2010) *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 24 (11), 1583-1594.

57. Regazzoni, L., Bertolotti, L., Vistoli, G., Colombo, R., Aldini, G., Serra, M., Carini, M., Caccialanza, G., De Lorenzi, E. A combined high-resolution mass spectrometric and in silico approach for the characterisation of small ligands of β 2-microglobulin (2010) *ChemMedChem*, 5 (7), 1015-1025.

58. Butler, K.V., Kalin, J., Brochier, C., Vistoli, G., Langley, B., Kozikowski, A.P. Rational design and simple chemistry yield a superior, neuroprotective HDAC6 inhibitor, tubastatin A (2010) *Journal of the American Chemical Society*, 132 (31), 10842-10846.

59. Vistoli, G., Pedretti, A., Mazzolari, A., Testa, B. Homology modeling and metabolism prediction of human carboxylesterase-2 using docking analyses by GriDock: A parallelized tool based on AutoDock 4.0 (2010) *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 24 (9), 771-787.

60. Regazzoni, L., Colombo, R., Bertolotti, L., Vistoli, G., Aldini, G., Serra, M., Carini, M., Facino, R.M., Giorgetti, S., Stoppini, M., Caccialanza, G., De Lorenzi, E. Screening of fibrillogenesis inhibitors of β 2 -microglobulin: Integrated strategies by mass spectrometry capillary electrophoresis and in silico simulations (2011) *Analytica Chimica Acta*, 685 (2), 153-161.

61. Lombardo, A., Licciardello, G., Bertuccio, A., Vistoli, G., Pedretti, A. Virtual screening approach for the identification of potential Citrus tristeza virus inhibitors (2011) *Acta Horticulturae*, 892, 257-264.

62. Vistoli, G., Pedretti, A., Testa, B. Chemodiversity and molecular plasticity: Recognition processes as explored by property spaces (2011) *Future Medicinal Chemistry*, 3 (8), 995-1010.

63. Aldini, G., Orioli, M., Rossoni, G., Savi, F., Braidotti, P., Vistoli, G., Yeum, K.-J., Negrisoli, G., Carini, M. The carbonyl scavenger carnosine ameliorates dyslipidaemia and renal function in Zucker obese rats (2011) *Journal of Cellular and Molecular Medicine*, 15 (6), 1339-1354.

64. Bajorath, J., Barreca, M.L., Bender, A., Bryce, R., Hutter, M., Laggner, C., Loughton, C., Martin, Y., Mitchell, J., Padova, A., Renner, S., Selzer, P.M., Sherman, W., Sippl, W., Taft, C., Tuccinardi, T., Vistoli, G., Willett, P. Ask the experts: focus on computational chemistry. (2011) *Future medicinal chemistry*, 3 (8), 909-921.

65. Bettinelli, I., Graziani, D., Marconi, C., Pedretti, A., Vistoli, G. The Approach of Conformational Chimeras to Model the Role of Proline-Containing Helices on GPCR Mobility: The Fertile Case of Cys-LTR1 (2011) *ChemMedChem*, 6 (7), 1217-1227.

66. Orioli, M., Vistoli, G., Regazzoni, L., Pedretti, A., Lapolla, A., Rossoni, G., Canevotti, R., Gamberoni, L., Previtali, M., Carini, M., Aldini, G. Design, Synthesis, ADME Properties, and Pharmacological Activities of β -Alanyl-D-histidine (D-Carnosine) Prodrugs with Improved Bioavailability (2011) *ChemMedChem*, 6 (7), 1269-1282.

67. Milanese, A., Gorincioi, E., Rajabi, M., Vistoli, G., Santaniello, E. New synthesis of 6[3-(1-adamantyl)-4-methoxyphenyl]-2-naphthoic acid and evaluation of the influence of adamantyl group on the DNA binding of a naphthoic retinoid (2011) *Bioorganic Chemistry*, 39 (4), 151-158.

68. Pedretti, A., De Luca, L., Marconi, C., Regazzoni, L., Aldini, G., Vistoli, G. Fragmental modeling of hPepT2 and analysis of its binding features by docking studies and pharmacophore mapping (2011) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 19 (15), 4544-4551.

69. Pittalà, V., Siracusa, M.A., Modica, M.N., Salerno, L., Pedretti, A., Vistoli, G., Cagnotto, A., Mennini, T., Romeo, G. Synthesis and molecular modeling of 1H-pyrrolopyrimidine-2,4-dione derivatives as ligands for the α 1-adrenoceptors (2011) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 19 (17), 5260-5276.

70. Pedretti, A., Labozzetta, A., Lo Monte, M., Beccari, A.R., Moriconi, A., Vistoli, G. Exploring the activation mechanism of TRPM8 channel by targeted MD simulations (2011) *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 414 (1), 14-19.

71. Bolchi, C., Gotti, C., Binda, M., Fumagalli, L., Pucci, L., Pistillo, F., Vistoli, G., Valoti, E., Pallavicini, M. Unichiral 2-(2'-pyrrolidinyl)-1,4-benzodioxanes: The 2 R,2' S diastereomer of the N -methyl-7-hydroxy analogue is a potent α 4 β 2- and α 6 β 2-nicotinic acetylcholine receptor partial agonist (2011) *Journal of Medicinal Chemistry*, 54 (21), 7588-7601.

72. Kalin, J.H., Zhang, H., Gaudrel-Grosay, S., Vistoli, G., Kozikowski, A.P. Chiral Mercaptoacetamides Display Enantioselective Inhibition of Histone Deacetylase6 and Exhibit Neuroprotection in Cortical Neuron Models of Oxidative Stress (2012) *ChemMedChem*, 7 (3), 425-439.

73. Testa, B., Pedretti, A., Vistoli, G. Reactions and enzymes in the metabolism of drugs and other xenobiotics (2012) *Drug Discovery Today*, 17 (11-12), 549-560.
74. Riccardi Sirtori, F., Aldini, G., Colombo, M., Colombo, N., Malyszko, J., Vistoli, G., D'Alessio, R. Molecular Recognition of T:G Mismatched Base Pairs in DNA as Studied by Electrospray Ionization Mass Spectrometry (2012) *ChemMedChem*, 7 (6), 1112-1122.
75. Vistoli, G., Carini, M., Aldini, G. Transforming dietary peptides in promising lead compounds: The case of bioavailable carnosine analogs (2012) *Amino Acids*, 43 (1), 111-126.
76. Vistoli, G., Straniero, V., Pedretti, A., Fumagalli, L., Bolchi, C., Pallavicini, M., Valoti, E., Testa, B. Predicting the physicochemical profile of diastereoisomeric histidine-containing dipeptides by property space analysis (2012) *Chirality*, 24 (7), 566-576.
77. Zhang, H.-K., Eaton, J.B., Yu, L.-F., Nys, M., Mazzolari, A., Van Elk, R., Smit, A.B., Alexandrov, V., Hanania, T., Sabath, E., Fedolak, A., Brunner, D., Lukas, R.J., Vistoli, G., Ulens, C., Kozikowski, A.P. Insights into the structural determinants required for high-affinity binding of chiral cyclopropane-containing ligands to $\alpha 4\beta 2$ -nicotinic acetylcholine receptors: An integrated approach to behaviorally active nicotinic ligands (2012) *Journal of Medicinal Chemistry*, 55 (18), 8028-8037.
78. Ariza, A., Garzon, D., Abánades, D.R., de los Ríos, V., Vistoli, G., Torres, M.J., Carini, M., Aldini, G., Pérez-Sala, D. Protein haptentation by amoxicillin: High resolution mass spectrometry analysis and identification of target proteins in serum (2012) *Journal of Proteomics*, 77, 504-520.
79. Testa, B., Vistoli, G., Pedretti, A. Organic stereochemistry. Part 1. Symmetry elements and operations, classification of stereoisomers (2013) *Helvetica Chimica Acta*, 96 (1), 4-30.
80. Grouzmann, E., Gualtierotti, J.-B., Gerber-Lemaire, S., Abid, K., Brakch, N., Pedretti, A., Testa, B., Vistoli, G. Lack of enantioselectivity in the SULT1A3-catalyzed sulfoconjugation of normetanephrine enantiomers: An in vitro and computational study (2013) *Chirality*, 25 (1), 28-34.
81. Vistoli, G., De Maddis, D., Straniero, V., Pedretti, A., Pallavicini, M., Valoti, E., Carini, M., Testa, B., Aldini, G. Exploring the space of histidine containing dipeptides in search of novel efficient RCS sequestering agents (2013) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 66, 153-160.
82. Testa, B., Vistoli, G., Pedretti, A. Organic stereochemistry. Part 4: Isomerisms about single bonds and in cyclic systems (2013) *Helvetica Chimica Acta*, 96 (4), 564-623.
83. Testa, B., Vistoli, G., Pedretti, A., Caldwell, J. Organic stereochemistry. Part 5: Stereoselectivity in molecular and clinical pharmacology (2013) *Helvetica Chimica Acta*, 96 (5), 747-798.
84. Vistoli, G., Testa, B., Pedretti, A. Organic stereochemistry. Part 6: The conformation factor in molecular pharmacology (2013) *Helvetica Chimica Acta*, 96 (6), 1005-1031.
85. Vistoli, G., De Maddis, D., Cipak, A., Zarkovic, N., Carini, M., Aldini, G. Advanced glycoxidation and lipoxidation end products (AGEs and ALEs): An overview of their mechanisms of formation (2013) *Free Radical Research*, 47 (S1), 3-27.
86. Aldini, G., Vistoli, G., Stefek, M., Chondrogianni, N., Grune, T., Sereikaite, J., Sadowska-Bartosz, I., Bartosz, G. Molecular strategies to prevent, inhibit, and degrade advanced glycoxidation and advanced lipoxidation end products (2013) *Free Radical Research*, 47 (S1), 93-137.
87. Pellegrino, S., Ruscica, M., Magni, P., Vistoli, G., Gelmi, M.L. Antiproliferative activity on human prostate carcinoma cell lines of new peptidomimetics containing the spiroazepinoindolinone scaffold (2013) *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 21 (17), 5470-5479.
88. Ostacolo, C., Ambrosino, P., Russo, R., Lo Monte, M., Soldovieri, M.V., Laneri, S., Sacchi, A., Vistoli, G., Taglialatela, M., Calignano, A. Isoxazole derivatives as potent transient receptor potential melastatin type 8 (TRPM8) agonists (2013) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 69, 659-669.
89. Ferraboschi, P., Colombo, D., Legnani, L., Toma, L., Grisenti, P., Vistoli, G., Meneghetti, F. Crystallographic, spectroscopic, and theoretical investigation of the efficiently separated 21R and 21S-diastereoisomers of argatroban (2013) *Chirality*, 25 (12), 871-882.
90. Bolchi, C., Valoti, E., Binda, M., Fasoli, F., Ferrara, R., Fumagalli, L., Gotti, C., Matucci, R., Vistoli, G., Pallavicini, M. Design, synthesis and binding affinity of acetylcholine carbamoyl analogues (2013) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 23 (23), 6481-6485.
91. Cilurzo, F., Vistoli, G., Gennari, C.G.M., Selmin, F., Gardoni, F., Franzè, S., Campisi, M., Minghetti, P. The role of the conformational profile of polysaccharides on skin penetration: The case of hyaluronan and its sulfates (2014) *Chemistry and Biodiversity*, 11 (4), 551-561.

92. Cilurzo, F., Vistoli, G., Selmin, F., Gennari, C.G.M., Musazzi, U.M., Franzé, S., Lo Monte, M., Minghetti, P. An insight into the skin penetration enhancement mechanism of N-methylpyrrolidone (2014) *Molecular Pharmaceutics*, 11 (3), 1014-1021.
93. Colzani, M., Criscuolo, A., De Maddis, D., Garzon, D., Yeum, K.-J., Vistoli, G., Carini, M., Aldini, G. A novel high resolution MS approach for the screening of 4-hydroxy-trans-2-nonenal sequestering agents (2014) *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 91, 108-118.
94. Bertolotti, L., Regazzoni, L., Altomare, A., Colombo, R., Colzani, M., Vistoli, G., Marchese, L., Carini, M., De Lorenzi, E., Aldini, G. Advanced glycation end products of beta2-microglobulin in uremic patients as determined by high resolution mass spectrometry (2014) *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 91, 193-201.
95. Aldini, G., Carini, M., Yeum, K.-J., Vistoli, G. Novel molecular approaches for improving enzymatic and nonenzymatic detoxification of 4-hydroxynonenal: Toward the discovery of a novel class of bioactive compounds (2014) *Free Radical Biology and Medicine*, 69, 145-156.
96. Del Bello, F., Bonifazi, A., Quaglia, W., Mazzolari, A., Barocelli, E., Bertoni, S., Matucci, R., Nesi, M., Piergentili, A., Vistoli, G. Mode of interaction of 1,4-dioxane agonists at the M2 and M3 muscarinic receptor orthosteric sites (2014) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 24 (15), 3255-3259.
97. Testa, B., Vistoli, G., Pedretti, A. Small molecules as exemplars of emergent properties and diversification into the 'adjacent possible' (2014) *Chemistry and Biodiversity*, 11 (9), 1309-1329.
98. Di Domizio, A., Vitriolo, A., Vistoli, G., Pedretti, A. SPILLO-PBSS: Detecting hidden binding sites within protein 3D-structures through a flexible structure-based approach (2014) *Journal of Computational Chemistry*, 35 (27), 2005-2017.
99. Bonifazi, A., Yano, H., Del Bello, F., Farande, A., Quaglia, W., Petrelli, R., Matucci, R., Nesi, M., Vistoli, G., Ferré, S., Piergentili, A. Synthesis and biological evaluation of a novel series of heterobivalent muscarinic ligands based on xanomeline and 1-[3-(4-butylpiperidin-1-yl)propyl]-1,2,3,4-tetrahydroquinolin-2-one (77-LH-28-1) (2014) *Journal of Medicinal Chemistry*, 57 (21), 9065-9077.
100. Vistoli, G., Brizzolari, A., Faioni, E., Razzari, C., Santaniello, E. Naturally occurring N6-substituted adenosines (cytokinin ribosides) are in vitro inhibitors of platelet aggregation: An in silico evaluation of their interaction with the P2Y12 receptor (2014) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 24 (24), 5652-5655.
101. Cheng, J., Giguère, P.M., Onajole, O.K., Lv, W., Gaisin, A., Gunosewoyo, H., Schmerberg, C.M., Pogorelov, V.M., Rodriguiz, R.M., Vistoli, G., Wetsel, W.C., Roth, B.L., Kozikowski, A.P. Optimization of 2-phenylcyclopropylmethylamines as selective serotonin 2C receptor agonists and their evaluation as potential antipsychotic agents (2015) *Journal of Medicinal Chemistry*, 58 (4), 1992-2002.
102. Pedretti, A., Mazzolari, A., Ricci, C., Vistoli, G. Enhancing the reliability of GPCR models by accounting for flexibility of their pro-containing helices: The case of the human machr1 receptor (2015) *Molecular Informatics*, 34 (4), 216-227.
103. Musazzi, U.M., Matera, C., Dallanoce, C., Vacondio, F., De Amici, M., Vistoli, G., Cilurzo, F., Minghetti, P. On the selection of an opioid for local skin analgesia: Structure-skin permeability relationships (2015) *International Journal of Pharmaceutics*, 489 (1-2), 177-185.
104. Lammi, C., Zanoni, C., Arnoldi, A., Vistoli, G. Two Peptides from Soy β -Conglycinin Induce a Hypocholesterolemic Effect in HepG2 Cells by a Statin-Like Mechanism: Comparative in Vitro and in Silico Modeling Studies (2015) *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 63 (36), 7945-7951.
105. Tronino, D., Russo, R., Ostacolo, C., Mazzolari, A., De Caro, C., Avagliano, C., Laneri, S., La Rana, G., Sacchi, A., Della Valle, F., Vistoli, G., Calignano, A. Improvement of Topical Palmitoylethanolamide Anti-Inflammatory Activity by Pegylated Prodrugs (2015) *Molecular Pharmaceutics*, 12 (9), 3369-3379.
106. Bonifazi, A., Del Bello, F., Mammoli, V., Piergentili, A., Petrelli, R., Cimarelli, C., Pellei, M., Schepmann, D., Wunsch, B., Barocelli, E., Bertoni, S., Flammini, L., Amantini, C., Nabissi, M., Santoni, G., Vistoli, G., Quaglia, W. Novel potent N-methyl-d-aspartate (NMDA) receptor antagonists or σ 1 receptor ligands based on properly substituted 1,4-dioxane ring (2015) *Journal of Medicinal Chemistry*, 58 (21), 8601-8615.
107. Laurino, A., Matucci, R., Vistoli, G., Raimondi, L. 3-iodothyronamine (T1AM), a novel antagonist of muscarinic receptors (2016) *European Journal of Pharmacology*, 793, 35-42.

108. Colzani, M., De Maddis, D., Casali, G., Carini, M., Vistoli, G., Aldini, G. Reactivity, Selectivity, and Reaction Mechanisms of Aminoguanidine, Hydralazine, Pyridoxamine, and Carnosine as Sequestering Agents of Reactive Carbonyl Species: A Comparative Study (2016) *ChemMedChem*, 1778-1789.
109. Miwa, S., Treumann, A., Bell, A., Vistoli, G., Nelson, G., Hay, S., Von Zglinicki, T. Carboxylesterase converts Amplex red to resorufin: Implications for mitochondrial H₂O₂ release assays (2016) *Free Radical Biology and Medicine*, 90, 173-183.
110. Cocco, M., Miglio, G., Giorgis, M., Garella, D., Marini, E., Costale, A., Regazzoni, L., Vistoli, G., Orioli, M., Massulaha-Ahmed, R., Détraz-Durieux, I., Gros Lambert, M., Py, B.F., Bertinaria, M. Design, Synthesis, and Evaluation of Acrylamide Derivatives as Direct NLRP3 Inflammasome Inhibitors (2016) *ChemMedChem*, 1790-1803.
111. Silva, R.O., de Oliveira, A.S., Nunes Lemes, L.F., de Camargo Nascente, L., Coelho do Nascimento Nogueira, P., Silveira, E.R., Brand, G.D., Vistoli, G., Cilia, A., Poggesi, E., Buccioni, M., Marucci, G., Bolognesi, M.L., Romeiro, L.A.S. Synthesis and structure–activity relationships of novel arylpiperazines as potent antagonists of α 1-adrenoceptor (2016) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 122, 601-610.
112. Gennari, C.G.M., Franzè, S., Pellegrino, S., Corsini, E., Vistoli, G., Montanari, L., Minghetti, P., Cilurzo, F. Skin Penetrating Peptide as a Tool to Enhance the Permeation of Heparin through Human Epidermis (2016) *Biomacromolecules*, 17 (1), 46-55.
113. Shen, S., Benoy, V., Bergman, J.A., Kalin, J.H., Frojuello, M., Vistoli, G., Haeck, W., Van Den Bosch, L., Kozikowski, A.P. Bicyclic-Capped Histone Deacetylase 6 Inhibitors with Improved Activity in a Model of Axonal Charcot-Marie-Tooth Disease (2016) *ACS Chemical Neuroscience*, 7 (2), 240-258.
114. Vistoli, G., Treumann, A., von Zglinicki, T., Miwa, S. Data from molecular dynamics simulations in support of the role of human CES1 in the hydrolysis of Amplex Red (2016) *Data in Brief*, 6, 865-870.
115. Matucci, R., Nesi, M., Martino, M.V., Bellucci, C., Manetti, D., Ciuti, E., Mazzolari, A., Dei, S., Guandalini, L., Teodori, E., Vistoli, G., Romanelli, M.N. Carbachol dimers as homobivalent modulators of muscarinic receptors (2016) *Biochemical Pharmacology*, 108, 90-101.
116. Regazzoni, L., Colombo, S., Mazzolari, A., Vistoli, G., Carini, M. Serum albumin as a probe for testing the selectivity of irreversible cysteine protease inhibitors: The case of vinyl sulfones (2016) *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 124, 294-302.
117. Lammi, C., Aiello, G., Vistoli, G., Zanoni, C., Arnoldi, A., Sambuy, Y., Ferruzza, S., Ranaldi, G. A multidisciplinary investigation on the bioavailability and activity of peptides from lupin protein (2016) *Journal of Functional Foods*, 24, 297-306.
118. Testa, B., Vistoli, G., Pedretti, A. Mechanisms and pharmaceutical consequences of processes of stereoisomerisation - A didactic excursion (2016) *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 88, 101-123.
119. Stec, J., Onajole, O.K., Lun, S., Guo, H., Merenbloom, B., Vistoli, G., Bishai, W.R., Kozikowski, A.P. Indole-2-carboxamide-based MmpL3 Inhibitors Show Exceptional Antitubercular Activity in an Animal Model of Tuberculosis Infection (2016) *Journal of Medicinal Chemistry*, 59 (13), 6232-6247.
120. Pedretti, A., Granito, C., Mazzolari, A., Vistoli, G. Structural Effects of Some Relevant Missense Mutations on the MECP2-DNA Binding: A MD Study Analyzed by Rescore+, a Versatile Rescoring Tool of the VEGA ZZ Program (2016) *Molecular Informatics*, 424-433.
121. Vistoli, G., Colzani, M., Mazzolari, A., De Maddis, D., Grazioso, G., Pedretti, A., Carini, M., Aldini, G. Computational approaches in the rational design of improved carbonyl quenchers: Focus on histidine containing dipeptides (2016) *Future Medicinal Chemistry*, 8 (14), 1721-1737.
122. Lammi, C., Zanoni, C., Arnoldi, A., Vistoli, G. Peptides Derived from Soy and Lupin Protein as Dipeptidyl-Peptidase IV Inhibitors: In Vitro Biochemical Screening and in Silico Molecular Modeling Study (2016) *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 64 (51), 9601-9606.
123. Del Bello, F., Bonifazi, A., Giorgioni, G., Petrelli, R., Quaglia, W., Altomare, A., Falcicchio, A., Matucci, R., Vistoli, G., Piergentili, A. Novel muscarinic acetylcholine receptor hybrid ligands embedding quinuclidine and 1,4-dioxane fragments (2017) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 137, 327-337.
124. Peters, V., Schmitt, C.P., Weigand, T., Klingbeil, K., Thiel, C., van den Berg, A., Calabrese, V., Nawroth, P., Fleming, T., Forsberg, E., Wagner, A.H., Hecker, M., Vistoli, G. Allosteric inhibition of

carnosinase (CN1) by inducing a conformational shift (2017) *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 32 (1), 1102-1110.

125. Del Bello, F., Bonifazi, A., Giannella, M., Giorgioni, G., Piergentili, A., Petrelli, R., Cifani, C., Micioni Di Bonaventura, M.V., Keck, T.M., Mazzolari, A., Vistoli, G., Cilia, A., Poggesi, E., Matucci, R., Quaglia, W. The replacement of the 2-methoxy substituent of N-((6,6-diphenyl-1,4-dioxan-2-yl)methyl)-2-(2-methoxyphenoxy)ethan-1-amine improves the selectivity for 5-HT_{1A} receptor over α ₁-adrenoceptor and D₂-like receptor subtypes (2017) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 125, 233-244.

126. Russo, G., Grumetto, L., Barbato, F., Vistoli, G., Pedretti, A. Prediction and mechanism elucidation of analyte retention on phospholipid stationary phases (IAM-HPLC) by in silico calculated physico-chemical descriptors (2017) *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 99, 173-184.

127. Degani, G., Altomare, A.A., Colzani, M., Martino, C., Mazzolari, A., Fritz, G., Vistoli, G., Popolo, L., Aldini, G. A capture method based on the VC1 domain reveals new binding properties of the human receptor for advanced glycation end products (RAGE) (2017) *Redox Biology*, 11, 275-285.

128. Mazzolari, A., Coppa, C., Altomare, A., Degani, G., Vistoli, G. Data from docking simulations to develop an efficient strategy able to evaluate the interactions between RAGE and MDA-induced albumin adducts (2017) *Data in Brief*, 12, 656-661.

129. Vistoli, G., Mazzolari, A., Testa, B., Pedretti, A. Binding Space Concept: A New Approach to Enhance the Reliability of Docking Scores and Its Application to Predicting Butyrylcholinesterase Hydrolytic Activity (2017) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 57 (7), 1691-1702.

130. Rocco, P., Cilurzo, F., Minghetti, P., Vistoli, G., Pedretti, A. Molecular Dynamics as a tool for in silico screening of skin permeability (2017) *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 106, 328-335.

131. Baron, G., Altomare, A., Regazzoni, L., Redaelli, V., Grandi, S., Riva, A., Morazzoni, P., Mazzolari, A., Carini, M., Vistoli, G., Aldini, G. Pharmacokinetic profile of bilberry anthocyanins in rats and the role of glucose transporters: LC-MS/MS and computational studies (2017) *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 144, 112-121.

132. Rocco, P., Cilurzo, F., Minghetti, P., Vistoli, G., Pedretti, A. Simulation data for an estimation of the maximum theoretical value and confidence interval for the correlation coefficient (2017) *Data in Brief*, 14, 291-294.

133. Mol, M., Regazzoni, L., Altomare, A., Degani, G., Carini, M., Vistoli, G., Aldini, G. Enzymatic and non-enzymatic detoxification of 4-hydroxynonenal: Methodological aspects and biological consequences (2017) *Free Radical Biology and Medicine*, 111, 328-344.

134. Vistoli, G., Colzani, M., Mazzolari, A., Gilardoni, E., Rivaletto, C., Carini, M., Aldini, G. Quenching activity of carnosine derivatives towards reactive carbonyl species: Focus on α -(methylglyoxal) and β -(malondialdehyde) dicarbonyls (2017) *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 492 (3), 487-492.

135. Vistoli, G., Mantovani, C., Gervasoni, S., Pedretti, A., Aldini, G. Key factors regulating protein carbonylation by α,β unsaturated carbonyls: A structural study based on a retrospective meta-analysis (2017) *Biophysical Chemistry*, 230, 20-26.

136. Beccari, A.R., Gemei, M., Monte, M.L., Menegatti, N., Fanton, M., Pedretti, A., Bovolenta, S., Nucci, C., Molteni, A., Rossignoli, A., Brandolini, L., Taddei, A., Za, L., Liberati, C., Vistoli, G. Novel selective, potent naphthyl TRPM8 antagonists identified through a combined ligand-and structure-based virtual screening approach (2017) *Scientific Reports*, 7 (1), art. no. 10999, .

137. Mol, M., Degani, G., Coppa, C., Baron, G., Popolo, L., Carini, M., Aldini, G., Vistoli, G., Altomare, A. Advanced lipoxidation end products (ALEs) as RAGE binders: Mass spectrometric and computational studies to explain the reasons why (2018) *Redox Biology*, Dec 18:101083. doi: 10.1016/j.redox.2018.101083.

138. Pedretti, A., Mazzolari, A., Vistoli, G., Testa, B. MetaQSAR: An Integrated Database Engine to Manage and Analyze Metabolic Data (2018) *Journal of Medicinal Chemistry*, 61 (3), 1019-1030.

139. Poce, G., Coccozza, M., Alfonso, S., Consalvi, S., Venditti, G., Fernandez-Menendez, R., Bates, R.H., Barros Aguirre, D., Ballell, L., De Logu, A., Vistoli, G., Biava, M. In vivo potent BM635 analogue with improved drug-like properties (2018) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 145, 539-550.

140. Fumagalli, L., Pucciarini, L., Regazzoni, L., Gilardoni, E., Carini, M., Vistoli, G., Aldini, G., Sardella, R. Direct HPLC separation of carnosine enantiomers with two chiral stationary phases based on penicillamine and teicoplanin derivatives (2018) *Journal of Separation Science*, 41 (6), 1240-1246.
141. Del Bello, F., Bonifazi, A., Giorgioni, G., Cifani, C., Micioni Di Bonaventura, M.V., Petrelli, R., Piergentili, A., Fontana, S., Mammoli, V., Yano, H., Matucci, R., Vistoli, G., Quaglia, W. 1-[3-(4-Butylpiperidin-1-yl)propyl]-1,2,3,4-tetrahydroquinolin-2-one (77-LH-28-1) as a Model for the Rational Design of a Novel Class of Brain Penetrant Ligands with High Affinity and Selectivity for Dopamine D 4 Receptor (2018) *Journal of Medicinal Chemistry*, 61 (8), 3712-3725.
142. Aiello, G., Ferruzza, S., Ranaldi, G., Sambuy, Y., Arnoldi, A., Vistoli, G., Lammi, C. Behavior of three hypocholesterolemic peptides from soy protein in an intestinal model based on differentiated Caco-2 cell (2018) *Journal of Functional Foods*, 45, 363-370.
143. Pedretti, A., Mazzolari, A., Vistoli, G. WarpEngine, a Flexible Platform for Distributed Computing Implemented in the VEGA Program and Specially Targeted for Virtual Screening Studies (2018) *Journal of Chemical Information and Modeling*, 58 (6), 1154-1160.
144. Aldini, G., Altomare, A., Baron, G., Vistoli, G., Carini, M., Borsani, L., Sergio, F. N-Acetylcysteine as an antioxidant and disulphide breaking agent: the reasons why (2018) *Free Radical Research*, 52 (7), 751-762.
145. Colzani, M., Regazzoni, L., Criscuolo, A., Baron, G., Carini, M., Vistoli, G., Lee, Y.-M., Han, S.-I., Aldini, G., Yeum, K.-J. Isotopic labelling for the characterisation of HNE-sequestering agents in plant-based extracts and its application for the identification of anthocyanidins in black rice with giant embryo (2018) *Free Radical Research*, 52 (8), 896-906.
146. Fumagalli, L., Regazzoni, L.G., Straniero, V., Valoti, E., Aldini, G., Vistoli, G., Carini, M., Picozzi, C. Stressed degradation studies of domiphen bromide by LC-ESI-MS/MS identify a novel promising antimicrobial agent (2018) *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 159, 224-228.
147. Fumagalli, L., Moretto, A., Gilardoni, E., Picozzi, C., Vistoli, G., Carini, M. Data on thermal and hydrolytic stability of both domiphen bromide and para-bromodomiphen bromide (2018) *Data in Brief*, 20, 1363-1366.
148. Mazzolari, A., Vistoli, G., Testa, B., Pedretti, A. Prediction of the formation of reactive metabolites by a novel classifier approach based on enrichment factor optimization (EFO) as implemented in the VEGA program (2018) *Molecules*, 23 (11), art. no. 2955, .
149. Anderson, E.J., Vistoli, G., Katunga, L.A., Funai, K., Regazzoni, L., Blake Monroe, T., Gilardoni, E., Cannizzaro, L., Colzani, M., De Maddis, D., Rossoni, G., Canevotti, R., Gagliardi, S., Carini, M., Aldini, G. A carnosine analog mitigates metabolic disorders of obesity by reducing carbonyl stress (2018) *Journal of Clinical Investigation*, 128 (12), 5280-5293.
150. Colotti, G., Saccoliti, F., Gramiccia, M., Di Muccio, T., Prakash, J., Yadav, S., Dubey, V.K., Vistoli, G., Battista, T., Mocci, S., Fiorillo, A., Bibi, A., Madia, V.N., Messori, A., Costi, R., Di Santo, R., Ilari, A. Structure-guided approach to identify a novel class of anti-leishmaniasis diaryl sulfide compounds targeting the trypanothione metabolism (2019) *Amino Acids*, Apr 29. doi: 10.1007/s00726-019-02731-4.
151. Everaert, I., Baron, G., Barbaresi, S., Gilardoni, E., Coppa, C., Carini, M., Vistoli, G., Bex, T., Stautemas, J., Blancquaert, L., Derave, W., Aldini, G., Regazzoni, L. Development and validation of a sensitive LC-MS/MS assay for the quantification of anserine in human plasma and urine and its application to pharmacokinetic study (2019) *Amino Acids*, 51 (1), 103-114.
152. Graziani, D., Caligari, S., Callegari, E., De Toma, C., Longhi, M., Frigerio, F., Dilernia, R., Menegon, S., Pinzi, L., Pirona, L., Tazzari, V., Valsecchi, A.E., Vistoli, G., Rastelli, G., Riva, C. Evaluation of Amides, Carbamates, Sulfonamides, and Ureas of 4-Prop-2-ynylidene-cycloalkylamine as Potent, Selective, and Bioavailable Negative Allosteric Modulators of Metabotropic Glutamate Receptor 5 (2019) *Journal of Medicinal Chemistry*, 62 (3), 1246-1273.
153. Bisceglia, F., Seghetti, F., Serra, M., Zusso, M., Gervasoni, S., Verga, L., Vistoli, G., Lanni, C., Catanzaro, M., De Lorenzi, E., Belluti, F. Prenylated Curcumin Analogues as Multipotent Tools to Tackle Alzheimer's Disease (2019) *ACS Chemical Neuroscience*, 10 (3), 1420-1433.

154. Mazzolari, A., Afzal, A.M., Pedretti, A., Testa, B., Vistoli, G., Bender, A. Prediction of UGT-mediated Metabolism Using the Manually Curated MetaQSAR Database (2019) *ACS Medicinal Chemistry Letters*, 10 (4), 633-638.
155. Romeiro, L.A.S., Da Costa Nunes, J.L., De Oliveira Miranda, C., Simoies Heyn Roth Cardoso, G., De Oliveira, A.S., Gandini, A., Kobrlova, T., Soukup, O., Rossi, M., Senger, J., Jung, M., Gervasoni, S., Vistoli, G., Petralla, S., Massenzio, F., Monti, B., Bolognesi, M.L. Novel Sustainable-by-Design HDAC Inhibitors for the Treatment of Alzheimer's Disease (2019) *ACS Medicinal Chemistry Letters*, 10 (4), 671-676.
156. Del Bello, F., Bonifazi, A., Giorgioni, G., Quaglia, W., Amantini, C., Morelli, M.B., Santoni, G., Battiti, F.O., Vistoli, G., Cilia, A., Piergentili, A. Chemical manipulations on the 1,4-dioxane ring of 5-HT_{1A} receptor agonists lead to antagonists endowed with antitumor activity in prostate cancer cells (2019) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 461-473.
157. Pedretti, A., Mazzolari, A., Gervasoni, S., Vistoli, G. Rescoring and linearly combining: A highly effective consensus strategy for virtual screening campaigns (2019) *International Journal of Molecular Sciences*, 20 (9), art. no. 2060, .
158. Baron, G., Altomare, A., Fumagalli, L., Rumio, C., Carini, M., Vistoli, G., Aldini, G. Development of a direct ESI-MS method for measuring the tannin precipitation effect of proline-rich peptides and in silico studies on the proline role in tannin-protein interactions (2019) *Fitoterapia*, 136, art. no. 104163

4.2.3 Capitoli di libro

- A1. A. Pedretti, A.M. Villa, L. Villa, G. Vistoli, "Modelling of the Interactions of some Inhibitors with the PGHS-1 by BioDock - A Stochastic Approach to the Automated Docking of Ligands to Biomacromolecules". in *Computer-Assisted Lead Finding and Optimisation*, 487-495, Helvetica Chimica Acta (ISSN: 0018-019X) Verlag, Basel (1997).
- A2. G. Vistoli, A. Pedretti, L. Villa, B. Testa "The concept of Property space: The case of Acetylcholine" in *Pharmacokinetic Profiling in Drug Research* (ISBN-10: 3-906390-35-7) Verlag – Zurich (2006)
- A3. B. Testa, G. Vistoli, A. Pedretti, Musings on ADME predictions and molecular structure, in *Virtual ADMET assessment in target selection and maturation*, pp 29-42, (ISBN: 1-58603-703-X), IOS Press (2006)
- A4. G. Vistoli, A. Pedretti, B. Testa, Molecular Fields to Assess Recognition Forces and Property Spaces, in *Virtual ADMET assessment in target selection and maturation*, pp 119-132, (ISBN: 1-58603-703-X) IOS Press (2006)
- A5. G. Vistoli, A. Pedretti Molecular Fields to Assess Recognition Forces and Property Spaces *Comprehensive Medicinal Chemistry II*, (ISBN [Volume 5]: 0-08-044518-7) Volume 5, 577-602, Elsevier (2007)
- A6. B. Testa, G. Vistoli, A. Pedretti A Fresh Look at Molecular Structure and Properties in *Molecular Drug Properties*, Mannhold. Ed. pp 3-23 (ISBN: 978-3-527-31755-4) Wiley-VCH (2007)
- A7. G. Vistoli, A. Pedretti Molecular Fields to Assess Recognition Forces and Property Spaces, *Comprehensive Medicinal Chemistry II*, (ISBN [Volume 5]: 0-08-044518-7) Volume 5, 577-602, Elsevier (2007)
- A8. G. Aldini, KJ Yeum, G. Vistoli Covalent Modifications of Albumin Cys34 as a Biomarker of Mild Oxidative Stress in Biomarkers for Antioxidant Defense and Oxidative Damage (ISBN-10: 0-8138-1535-5) pp 229-242 Wiley-VCH (2010)
- A9. Vistoli, G. Carnosine in the context of histidine-containing dipeptides (2015) *Food and Nutritional Components in Focus*, (ISSN: 20451695) 2015- (8), pp. 3-22.
- A10. Vistoli, G., Pedretti, A., Mazzolari, A., Testa, B. Approaching pharmacological space: Events and components (2018) *Methods in Molecular Biology*, 1800, (ISSN: 10643745) pp. 245-274.

4.3 Partecipazione in qualità di relatore su invito (plenary e key note lectures) a congressi e convegni di interesse internazionale

- G. Vistoli, A. Pedretti, L. Villa, B. Testa "The concept of Lipophilicity Space" LogP 2004: The 3rd Lipophilicity Symposium - Physicochemical and Biological Profiling in Drug Research, Zurich (CH), February 29 - March 4, 2004
- G. Vistoli, "Dynamic simulations of homology modelled proteins: Fertile or futile?" Computational methods in drug design, Riva San Vitale 3-6 April 2005
- G. Vistoli, "Molecular Fields to assess recognition forces" Solvay Pharmaceutical Conference: Virtual ADMET Assessment in Target Selection and Maturation, Lucerne 11-13 May 2005
- G. Vistoli "Modeling of GPCR proteins using a novel fragmental approach: the enigmatic case of human ghrelin receptor", European Network Of Doctoral Studies in Pharmaceutical Sciences, 2-4 November 2006, Catania
- G. Vistoli "From drug design to drug delivery: new opportunities from molecular modeling", 2nd AltUN Annual Meeting, Perugia, 7-8 March, 2008
- G. Vistoli, A. Pedretti, G. Aldini, E. Valoti, B. Testa "Chemodiversity and property space: innovative approaches to investigate the dynamic profile of stereoisomers", Chirality, ICSD23 2011, Liverpool 10-13 July 2011
- G. Vistoli "Polymer behavior during glass transition as assessed by MD simulations", II Workshop on Stability of Amorphous Pharmaceuticals, Pisa 10-12 December 2015
- G. Vistoli "From molecular docking to virtual screening approaches: an in silico travel poking around the recognition event", European School of Medicinal Chemistry ESMEC, Urbino, July 2 – 6, 2017
- G. Vistoli "The biochemistry of drug metabolism", Summer School in Pharmaceutical Analysis SSPA-2017, Rimini, 18-20 September 2017

4.4 Comunicazioni orali a congressi e convegni di interesse internazionale

- L. Fumagalli, M. Pallavicini, A. Pedretti, E. Valoti, L. Villa, G. Vistoli, "Aspetti conformazionali nell'interazione con l' α 1A adrenocettore: un approccio combinato QSAR-docking molecolare" XVI Convegno Nazionale della Divisione Italiana di Chimica Farmaceutica, Sorrento 18 - 22 settembre 2002
- G. Vistoli, A. Pedretti, L. Villa, B. Testa, "RANge & SENSibilità (RANSEN): un nuovo approccio per indagare il concetto di spazio delle proprietà nell'analisi QSAR dinamica", XVII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana, Pisa, 6-10 settembre 2004 (comunicazione orale tenuta dal Dott. G. Vistoli)
- G. Vistoli, L. De Luca, A. Pedretti "Modeling of human glutamate transporter EAAT1 using a fragmental approach and Analysis of its interaction capacities through molecular docking and pharmacophore mapping", XVIII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica, Farmaceutica della Società Chimica Italiana. Chieti-Pescara, 16-20 Settembre 2007
- G. Vistoli, A. Pedretti, A. Mazzolari, B. Testa "In silico prediction of metabolism by human carboxylesterase-1 (hCES1) combining docking analyses and MD simulations", logP 2009 PhysChem and ADMET Profiling in Drug Research, Zurich 9-11 Febbraio 2009
- Bettinelli, D. Graziani, A. Leonardi, C. Marconi, G. Motta, A. Pedretti, G. Vistoli. "The strategy of the conformational chimeras to model the GPCR flexibility: the fertile case of mGluR5 allosteric modulators", XX National Meeting on Medicinal Chemistry, Abano Terme, 12-16 September 2010
- G. Vistoli, A. Pedretti, C. Marconi, G. Aldini, "Combined in silico approaches for drug design and pharmacokinetic optimization of a set of carnosine analogues as potent and selective carbonyl quenchers", 18th European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationships (EuroQSAR 2010), Rhodes, 19-24 Settembre 2010
- G. Vistoli, V. Straniero, L. Fumagalli, D. De Maddis, M. Lo Monte, A. Pedretti, M. Carini, E. Valoti, G. Aldini "Exploring the space of histidine containing dipeptides in search of novel efficient RCS

sequestering agents”, XXIV Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Lecce, 11-16 Settembre, 2011

- G. Vistoli, A. Mazzolari, H.K. Zhang, J.B. Eaton, L.F. Yu, M. Nys, R. van Elk, A.B. Smit, D. Brunner, R.J. Lukas, C. Ulens, A.P. Kozikowski. “Combining X-ray crystal studies, homology modeling and docking simulations to design novel $\alpha4\beta2$ ligands for use in depression”, XXI National Meeting on Medicinal Chemistry NMMC 2012, Palermo, 17-20 Luglio, 2012
- G. Vistoli, G. Aldini “Combining simple chemistry and in silico approaches to rationally design of carnosine analogues as bioavailable and effective carbonyl quenchers”, Spanish-Italian Medicinal Chemistry Congress (SIMCC), Barcellona, 12-15 Luglio 2015

4.4 Membro di comitati scientifici e organizzativi

- Membro del Comitato organizzatore del convegno Computationally driven drug discovery CDDD-1, tenutosi a L’Aquila, 21-23 Novembre 2011
- Membro del Comitato organizzatore del convegno Computationally driven drug discovery CDDD-2, tenutosi a Genova, 4-6 Febbraio 2013
- Membro del Comitato organizzatore del convegno Computationally driven drug discovery CDDD-3, tenutosi a Verona, 4-6 Marzo 2014
- Membro del Comitato organizzatore del convegno Computationally driven drug discovery CDDD-4, tenutosi a Pomezia, Roma, 24-26 Febbraio 2015
- Membro del Comitato scientifico della Summer School in Pharmaceutical Analysis (SSPA2017), tenutasi a Rimini, 18-20 Settembre 2017
- Membro del Comitato organizzatore del convegno Computationally driven drug discovery CDDD-5, tenutosi a Milano, presso l’IFOM, 16-17 Novembre 2017
- Membro del Comitato scientifico della Summer School in Pharmaceutical Analysis (SSPA2018), tenutasi a Rimini, 19-21 Settembre 2018
- Membro del Comitato organizzatore del convegno Computationally driven drug discovery CDDD-6, tenutosi a Roma, presso l’Università Cattolica del Sacro Cuore, 28-29 Marzo 2019
- Membro del Comitato organizzatore del Congresso nazionale di Chimica Farmaceutica (National Meeting in Medicinal Chemistry XXVI NMMC 2019 & Nuove Prospettive in Chimica Farmaceutica - NPCF12) che si terrà a Milano, 16-19 Luglio 2019
- Membro del Comitato scientifico della Summer School in Pharmaceutical Analysis (SSPA2019) che si terrà a Pescara, 11-13 Settembre 2019

4.5 Partecipazione a progetti

- PRIN 2001 – titolo progetto: Progettazione, sintesi e valutazione farmacologica di farmaci antiaterosclerotici e ipolipemizzanti, Area 03, Responsabile UNIMI: Prof. L. Villa, Durata 24 mesi
- PRIN 2003 – titolo progetto: Progettazione, sintesi e valutazione farmacologica di farmaci antiaterosclerotici e ipolipemizzanti, Area 03, Responsabile UNIMI: Prof. E. Valoti, durata 24 mesi
- PRIN 2004 – titolo progetto: Metodologie Avanzate In Spettrometria Di Massa Per Lo Sviluppo Di Inibitori Dei Processi Degenerativi Da Stress Carbonilico: Peptidi/Peptoidi Come Agenti Detossificanti Di Aldeidi Citotossiche, Area 03, Responsabile UNIMI: Prof. R. Maffei Facino, durata 24 mesi
- PRIN 2005 – titolo progetto: Progettazione, sintesi e valutazione farmacologica di farmaci antiaterosclerotici e ipolipemizzanti, Area 03, Responsabile UNIMI: Prof. E. Valoti, durata 24 mesi
- MIUR 2006 - Progetto MIUR (DM27909) - Legge n. 297/99 (programma FAR) in risposta al Bando Biotecnologie Lombardia 2005: “Ricerca, caratterizzazione e sviluppo di molecole

peptidomimetiche della L-carnosina quali inibitori di processi patologici degenerativi da stress carbonilico". Responsabile UNIMI Prof.ssa Marina Carini - Progetto triennale 01/03/2006 - 28/02/2009 in partenariato con Flamma Fabbrica Lombarda Amino Acidi S.p.A.

- PRIN 2009 – titolo progetto: Progettazione E Sintesi Di Inibitori Della Farnesil Transferasi E Sviluppo Di Metodologie Bioanalitiche Per Lo Studio Delle Interazioni Ligando-Proteina E Dei Meccanismi Coinvolti Nella Profiferazione Cellulare, Area 05, Responsabile UNIMI: Prof. E. Valoti, durata 24 mesi
- Responsabile progetto LISA-CINECA HPL13DQBD2 dal titolo "Development of Web interface and optimization for the LiGen software" dal 19-09-2013 al 10-03-2014
- Team member del progetto "MASS Spectrometry TRaining network for Protein Lipid adduct Analysis" che è stato finanziato nell'ambito della call H2020-MSCA-ITN-2015.

4.6 Responsabilità di studi e ricerche scientifiche affidati da qualificate istituzioni

2010-2011	Contratto di consulenza concernente la progettazione razionale assistita al computer di nuovi ligandi nicotinici attivi sul sistema nervoso centrale; committente: University of Illinois at Chicago - Dept. of Medicinal Chemistry and Pharmacognosy. Tale contratto rientra nell'ambito della collaborazione con il Prof. A.P. Kozikowski per il progetto di ricerca U19MH085193 del National Institute of Mental Health (NIMH, USA).
2011-2012	Contratto di consulenza concernente lo sviluppo di modelli di omologia per proteine transmembrana e la progettazione di ligandi attivi e selettivi per tali target proteici committente Recordati SpA.
2012	Contratto di servizio concernente simulazioni di docking sul canale ionico TRPM8; committente Axxam SpA.
2014	Contratto di servizio sviluppo di modelli di omologia dei recettori nicotinici da impiegarsi nel disegno razionale di nuovi ligandi selettivi; committente: University of Illinois at Chicago - Dept. of Medicinal Chemistry and Pharmacognosy.
2014	Contratto di servizio concernente modellazione per omologia e simulazioni di docking sul canale ionico Kv 1.3; committente Axxam SpA.
2016	Contratto di servizio concernente la modellazione di recettori transmembrana tramite tecniche di omologia e simulazioni di docking molecolare; committente: Dompé SpA.
2017	Contratto di servizio concernente la modellazione di recettori transmembrana e simulazioni di docking molecolare su librerie proprietarie; committente: Dompé SpA.
2018	Contratto di servizio concernente simulazioni di virtual screening su librerie commercialmente disponibili e proprietarie; committente: Dompé SpA. Il presente contratto è stato poi arricchito con un addendum per la fornitura di ulteriori servizi al medesimo committente.

4.7 Brevetti

2011	Brevetto WO 2011/080139 A1: Amino Alcohol Derivatives And Their Therapeutic Activities, Applicants: Flamma Spa, Univ Degli Studi Milano, Negrisoli Gianpaolo, Canevotti Renato, Previtali Massimo, Aldini Giancarlo, Carini Marina, Orioli Marica, Vistoli Giulio; Inventors: Negrisoli Gianpaolo, Canevotti Renato, Previtali Massimo, Aldini Giancarlo, Carini Marina, Orioli Marica, Vistoli Giulio.
-------------	---

- 2012** Brevetto US 2012/0316212 A1: Amino Alcohol Derivatives And Their Therapeutic Activities; Owners (US): Flamma Spa, Univ Degli Studi Milano; Applicants: Flamma Spa, Univ Degli Studi Milano, Negrisoni Gianpaolo, Canevotti Renato, Previtali Massimo, Aldini Giancarlo, Carini Marina, Orioli Marica, Vistoli Giulio; Inventors: Negrisoni Gianpaolo, Canevotti Renato, Previtali Massimo, Aldini Giancarlo, Carini Marina, Orioli Marica, Vistoli Giulio.
- 2013** Brevetto EP 2519507 B1: Amino Alcohol Derivatives And Their Therapeutic Activities Applicants: Flamma Spa, Univ Degli Studi Milano; Inventors: Negrisoni Gianpaolo, Canevotti Renato, Previtali Massimo, Aldini Giancarlo, Carini Marina, Orioli Marica, Vistoli Giulio.
- 2014** Brevetto US 8623900 B2: Amino Alcohol Derivatives And Their Therapeutic Activities; Owners (US): Flamma Spa, Univ Degli Studi Milano; Applicants: Flamma Spa, Univ Degli Studi Milano, Negrisoni Gianpaolo, Canevotti Renato, Previtali Massimo, Aldini Giancarlo, Carini Marina, Orioli Marica, Vistoli Giulio; Inventors: Negrisoni Gianpaolo, Canevotti Renato, Previtali Massimo, Aldini Giancarlo, Carini Marina, Orioli Marica, Vistoli Giulio.
- 2015** Brevetto EP 2041157 B1: Peptide Derivatives With Therapeutic Activity; Applicants: Flamma Spa; Inventors: Negrisoni Gianpaolo, Canevotti Renato, Aldini Giancarlo, Carini Marina, Orioli Marica, Vistoli Giulio.
- 2019** Brevetto WO2019/053626 A1: Compounds having preservative, antimicrobial and antiseptic activity; Applicants: Univ Degli Studi Milano; Inventors: Laura Fumagalli, Claudia Picozzi, Luca Regazzoni, Marina Carini, Giancarlo Aldini, Giulio Vistoli.

4.8 Partecipazione a comitati editoriali di riviste indicizzate

- Dal 2012 ad aprile 2019 è stato membro dell'editorial board di Chirality, Wiley Periodicals, Inc. (ISSN: 0899-0042), indicizzato sia da WOS sia da Scopus.
- Dal 2018 è membro dell'editorial board dell'International Journal of Molecular Sciences, sezione 'Molecular Informatics' (ISSN 1422-0067; CODEN: IJMCFK; ISSN 1661-6596 for printed edition), indicizzato sia da WOS sia da Scopus.
- Nel contesto delle attività per l'International Journal of Molecular Sciences è editor dello Special Issue "New Avenues in Molecular Docking for Drug Design".

4.9 Attività di ricerca presso atenei e istituti di ricerca esteri di alta qualificazione

Attività di ricerca presso i laboratori dell'Institut de Chimie Thérapeutique - Section de Pharmacie dell'Università di Losanna sotto la guida del Prof. Bernard Testa dal 01-11-1996 al 28-02-1997

4.10 Attività di valutazione di procedure di selezione competitive nazionali e internazionali

- 2012-2013** Valutatore di grant application per la Accademia Finlandese e partecipazione al meeting del Panel 6 a Helsinki il 30/1/2013.
- 2013** Valutatore progetti "Futuro in Ricerca 2013" del MIUR.
- 2013-2014** Valutatore di grant application per la Accademia Finlandese e partecipazione al meeting del Panel 6 a Helsinki il 29/1/2014.
- 2016** Valutatore di grant application per la Accademia Finlandese.

4.11 Supervisore post-Doc

- Supervisore della dott.ssa Angelica Mazzolari, titolare dal 1/8/2016 dell'assegno di ricerca dal titolo "Sviluppo di un approccio integrato per la predizione del metabolismo umano di farmaci e xenobiotici".
- Supervisore della dott.ssa Marica Gemei, titolare dal 1/7/2017 al 28/2/2019 dell'assegno di ricerca dal titolo "Sviluppo di una piattaforma innovativa per il riposizionamento di piccole molecole e prodotti naturali "safe in man" tramite la combinazione di approcci computazionali e campagne di screening traslazionali fenotipici ad alta efficienza".

4.12 Attività di revisione per riviste internazionali

Costante attività di revisione di manoscritti per le riviste per le più importanti riviste del settore chimico farmaceutico tra cui Journal of Medicinal Chemistry, ACS Medicinal Chemistry Letters, Future Medicinal Chemistry, European Journal of Medicinal Chemistry, British Journal of Pharmacology, Bioorganic & Medicinal Chemistry, Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, Journal of the American Chemical Society, Journal Of Enzyme Inhibition And Medicinal Chemistry, European Journal of Pharmaceutical Sciences, SAR and QSAR in Environmental Research, Journal of Chemical Information and Modeling, Molecules, Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, Current Medicinal Chemistry, Organic & Biomolecular Chemistry, Archives of Biochemistry and Biophysics, Computational Biology and Chemistry, Helvetica Chimica Acta, Journal of Computer-Aided Molecular Design, Journal of Molecular Modeling, Environmental Science & Technology, Biochemistry, PLOS ONE, PNAS, Scientific Reports, Journal of Molecular Structure, Cellular Physiology and Biochemistry, Xenobiotica, MedChemComm, Biochimie, Chemical Biology & Drug Design, Medicinal Research Reviews.

4.13 Collaborazioni scientifiche nazionali ed internazionali

L'attività di ricerca si è avvalsa di diverse collaborazioni nazionali ed internazionali, nella cui coordinazione il Prof. Giulio Vistoli ha avuto un ruolo preminente e che hanno portato a numerose pubblicazioni scientifiche *in extenso* (elencate al punto 4.2). Tali collaborazioni sono così schematizzabili:

- ventennale collaborazione scientifica con il Prof. Bernard Testa (Università di Losanna) che si è concretizzata in circa 30 pubblicazioni in extenso. Tale collaborazione si è rivolta principalmente allo studio della lipofilia molecolare, con lo sviluppo del concetto di spazio di proprietà, e alla predizione del metabolismo.
- collaborazione scientifica con il Prof. Alan Kozikowski (University of Illinois at Chicago) che si è concretata in 7 pubblicazioni in extenso. Inizialmente focalizzata sulla progettazione di ligandi nicotinici si è poi estesa allo studio di composti attivi su altri target di interesse terapeutico quali istone deacetilasi (HDAC) con particolare riferimento alla isoforma HDAC6, recettori serotoninergici e MmpL3.
- collaborazione con i Proff. Alessandro Piergentili e Wilma Quaglia (Università di Camerino) che si è concretizzata in 7 pubblicazioni in extenso principalmente dedicate all'analisi di ligandi muscarinici, dopaminici e serotoninergici
- Collaborazioni extradipartimentali che hanno portato ad almeno una pubblicazione scientifica in extenso:
 - Prof. Laura De Luca (Università di Messina); studio dell'enzima integrasi
 - Dott. L.M. Espinoza-Fonseca (University of Minnesota); studio del recettore muscarinico M1
 - Prof. Maria Novella Romanelli (Università di Firenze); simulazioni rivolte allo studio di ligandi muscarinici
 - Prof. Roberto Maggi (Università di Milano); studio dell'enzima seladin-1

- Prof. Enzo Santaniello (Università di Milano); progettazione razionali di ligandi enzimatici e recettoriali
- Dott. Erik Grouzmann (Lausanne University Hospital); studio dell'enzima SULT1A3
- Dott. Carmine Ostacolo (Università di Napoli Federico II); analisi di agonisti TRPM8 e predizione del metabolismo
- Prof. Massimo Bertinaria (Università di Torino); progettazione razionale di ligandi NLRP3
- Dott. Luiz Antonio Soares Romeiro (University of Brasília); analisi di antagonisti alfa1a-AR e di inibitori delle HDAC
- Dott.ssa Satomi Miwa (Newcastle University); predizione del metabolismo
- Dott.ssa Verena Peters (University Children's Hospital, Heidelberg); studio del meccanismo allosterico della carnosinase
- Prof. Roberto Di Santo (Università Sapienza, Roma) studio in silico di inibitori della tripanotione reductasi
- Prof.ssa Mariangela Biava (Università Sapienza, Roma) simulazione riguardanti inibitori di MmpL3

5. Attività gestionali ed organizzative

5.1 Attività gestionali di carattere istituzionale d'Ateneo

Per il biennio 2005-2006, il Prof. Giulio Vistoli è stato eletto rappresentante dei ricercatori delle Facoltà di Agraria, Farmacia, e Medicina Veterinaria al Senato Accademico dell'Università degli Studi di Milano

Nel 2012, il Prof. Giulio Vistoli è stato presidente effettivo per la seconda sessione degli esami di Stato per la professione del Farmacista

Nel 2019 è stato nominato referente per la Flagship 3 "Transforming science and society by advancing information, computation and communication" per il progetto 4EU+ a cui l'Università degli studi di Milano partecipa insieme Københavns Universitet di Copenaghen, Ruprecht-Karls-Universität di Heidelberg, Sorbonne Université di Parigi, Univerzita Karlova di Praga e Uniwersytet Warszawski. Tale progetto ha partecipato al bando Erasmus + Programme – Key Action 2 (KA2) – Cooperation for innovation and the exchange of good practices Call for Proposals EAC/A03/2018 – European Universities ed è risultato tra i progetti finanziati dal bando.

5.2 Attività gestionali riferibili alla ricerca

Il Prof. Giulio Vistoli coordina le attività di ricerca del gruppo di modellistica molecolare del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università degli Studi di Milano attualmente composto, oltre che dal Prof. Giulio Vistoli, dal Prof. Alessandro Pedretti e dalla dott.ssa Angelica Mazzolari, titolare dell'assegno di ricerca di cui Prof. Giulio Vistoli è il docente tutor. Negli anni il gruppo di ricerca si è avvalso anche del contributo di tre dottorandi, per i quali il Prof. Giulio Vistoli era docente guida (si veda punto 3.2.2) e di un secondo assegno di ricerca (si veda 4.11). Le attività gestionali riferibili alla partecipazione a progetti di ricerca (punto 4.5), a comitati scientifici e organizzativi (punto 4.4) così come alla responsabilità di studi e ricerche scientifiche affidati da qualificate istituzioni (punto 4.6) sono già state dettagliate nella precedente sezione riguardante le attività di Ricerca.

5.2 Attività gestionali riferibili alla didattica

Oltre ai collegi didattici dei corsi di Laurea a cui ha afferito come docente, il Prof. Giulio Vistoli è componente delle seguenti commissioni o gruppi di lavoro:

- CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE: Commissione paritetica dal 2016
- BIOTECNOLOGIE DEL FARMACO: Commissione per l'ammissione degli studenti (italiani e stranieri) dal 2017; Gruppo del riesame dal 2017 e Gruppo di lavoro revisione del Corso di laurea dal 2018.
- SCUOLA DI SPECIALIZZAZIONE IN FARMACIA OSPEDALIERA: Ha fatto parte della commissione giudicatrice della prova di ammissione alla Scuola.

Dal 2017 fa parte del Comitato di Direzione di Scienze del Farmaco per il quale si occupa di coordinare le attività di tutoraggio.

5.2 Attività gestionali riferibili al Dottorato

Dal 2010 al 2012 ha partecipato al collegio dei docenti [DOT0315795] Ateneo proponente: Università degli Studi di MILANO Titolo: "CHIMICA DEL FARMACO" Cicli: XXVI-XXVIII - Durata: 3 anni

Dal 2013 partecipa al collegio dei docenti [DOT1315771] Ateneo proponente: Università degli Studi di MILANO Titolo: "SCIENZE FARMACEUTICHE" Cicli: XXIX-XXXV - Durata: 3 anni

Membro della Commissione esaminatrice per l'ammissione nell'anno accademico 2011/2012 (XXVII ciclo) al corso di dottorato di ricerca in Chimica del farmaco, Università degli studi di Milano

Membro della Commissione giudicatrice dell'esame finale per il conseguimento del titolo di dottore di ricerca in Scienze Farmaceutiche, ciclo XXV, Università degli Studi di Messina (16-04-2013)

Membro della Commissione giudicatrice dell'esame finale per il conseguimento del titolo di dottore di ricerca in "Progettazione e sintesi di composti biologicamente attivi" XXVI ciclo, Università degli studi di Parma (28-03-2014)

Il Consiglio Direttivo della Divisione di Chimica Farmaceutica lo ha nominato membro del Consiglio Scientifico della Summer School of Pharmaceutical Analysis SSPA per il triennio 2017-2019.

Membro della Commissione esaminatrice per l'ammissione nell'anno accademico 2014/2015 (XXX ciclo) al corso di dottorato di ricerca in Scienze Farmaceutiche, Università degli Studi di Milano

Membro della Commissione esaminatrice per l'ammissione nell'anno accademico 2019/202 (XXXV ciclo) al corso di dottorato di ricerca in Scienze Farmaceutiche, Università degli Studi di Milano, i cui lavori si terranno nel mese di settembre 2019.

5.4 Attività gestionali dipartimentali

Dal 2014, il Prof. Giulio Vistoli fa parte della Giunta di Dipartimento

Nel periodo 2015-2016, il prof. Giulio Vistoli è stato responsabile del progetto di ricerca per la LINEA 2 - AZIONE B da titolo "Interaction capacities of the receptor for advanced glycation endproducts (RAGE) with suitably designed peptides and peptidomimetics, a multidisciplinary approach"

Data

2 luglio 2019

Luogo

MILANO