



AL MAGNIFICO RETTORE
DELL'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MILANO

COD. ID: 6799

Il sottoscritto chiede di essere ammesso a partecipare alla selezione pubblica, per titoli ed esami, per il conferimento di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche

Responsabile scientifico: **Prof. Giulio Vistoli**

Emanuela Sabato

CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

Cognome	Sabato
Nome	Emanuela

OCCUPAZIONE ATTUALE

Incarico	Struttura
Dottoranda di ricerca (fino al 30 Settembre 2024)	Dipartimento di Scienze Farmaceutiche - Università degli Studi di Milano

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

Titolo	Corso di studi	Università	anno conseguimento titolo
Dottorato Di Ricerca	Scienze Farmaceutiche	Università degli Studi di Milano	2025 (il corso di dottorato termina il 30 Settembre 2024. La tesi sarà sottomessa ad Ottobre 2024, difesa a Gennaio 2025)
Laurea Magistrale o equivalente	Chimica e Tecnologia Farmaceutiche (CTF)	Università degli Studi di Milano	2021
Abilitazione alla professione di Farmacista		Università degli Studi di Milano	2021

LINGUE STRANIERE CONOSCIUTE

lingue	livello di conoscenza
Italiano	Madrelingua
Inglese	C1



PREMI, RICONOSCIMENTI E BORSE DI STUDIO

anno	Descrizione premio
2021	Borsa di studio ministeriale - Dottorato di Ricerca XXXVII ciclo

ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA

Marzo 2023 - Settembre 2023: Visiting PhD Student presso l'Università di Vienna. Studi di Proteochemometria (PCM) su trasportatori ABC, sottofamiglia B. Sviluppo di workflow tailored (KNIME) per la creazione di modelli di classificazione con algoritmo XGBoost che correlano dataset presenti su ChEMBL con l'attività biologica su trasportatori ABC-B.

Ottobre 2021 - Settembre 2024: Dottoranda in Scienze Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Milano. Studi di intelligenza artificiale e machine learning per lo sviluppo di modelli predittivi, con diversi algoritmi e vari tipi di descrittori molecolari e fingerprint. Tutoraggio di studenti durante il laboratorio di Tesi magistrale sperimentale: studi di Homology Modelling, Molecular Dynamics, Docking Molecolare, Virtual Screening, ricerca di tasche allosteriche, modelli predittivi di classificazione.

Marzo 2020 - Marzo 2021: Tirocinio di Tesi sperimentale presso il Drug Design Lab dell'Università degli Studi di Milano. Studi *in silico* sulla proteina PCYOX1: Homology Modelling, Docking Molecolare, Dinamica Molecolare e campagne di Virtual Screening (in collaborazione con Ospedale Cardiologico Monzino di Milano).

Durante il tirocinio di Tesi magistrale sperimentale e, successivamente, durante il periodo di ricerca Dottorale, ho acquisito e migliorato competenze relative alla chimica farmaceutica computazionale, in particolare ho approfondito le tecniche di modellistica molecolare, come il Docking Molecolare, simulazioni di Dinamica Molecolare e campagne di Virtual Screening. Inoltre, ho maturato competenze nello sviluppo di modelli predittivi mediante metodiche di Intelligenza Artificiale.

Grazie alle esperienze di tutorato di studenti in tesi, periodo all'estero (Visiting PhD) e tutoraggi in ambito di progetti europei (4EU+), ho avuto l'opportunità di incrementare la mia attitudine al lavoro in team e alla sua gestione/supervisione, confrontarmi anche con gruppi di ricerca internazionali.

ATTIVITÀ PROGETTUALE

Anno	Progetto
2023	Studi di Proteochemometria (PCM) su trasportatori ABC, sottofamiglia B
2021-2024	IA nel drug discovery: sviluppo di nuove strategie per campagne di Virtual Screening
2020-2021	" <i>In silico</i> studies for drug discovery of prenylcysteine oxidase 1 (PCYOX1): a novel target in atherosclerotic-based diseases"

CONGRESSI, CONVEGNI E SEMINARI

Data	Titolo	Sede
26-30 Agosto 2024	XXVIII National Congress of Società Chimica Italiana	Milano, Italy



17-20 Settembre 2023	XXVIII National Meeting on Medicinal Chemistry (NMMC28)	Chieti-Pescara, Italy
10-15 Settembre 2023	BioExcel Summer School on Biomolecular Simulations 2023	Sardinia, Italy
26-30 Settembre 2022	23rd European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationship	Heidelberg, Germany
4-9 Settembre 2022	Advanced School in Drug Research and Development	Parma, Italy
15-20 Settembre 2019	EUROPIN Summer School on Drug Design	Vienna, Austria

PUBBLICAZIONI

Articoli su riviste
Bottoni, M., Martinelli, G., Maranta, N., Sabato, E. , Milani, F., Colombo, L., ... & Fico, G. (2024). From Primary Data to Ethnopharmacological Investigations on <i>Achillea erba-rotta</i> subsp. <i>moschata</i> (Wulfen) I. Richardson as a Remedy against Gastric Ailments in Valmalenco (Italy). <i>Plants</i> , 13(4), 539.
Mazzolari, A., Perazzoni, P., Sabato, E. , Lunghini, F., Beccari, A. R., Vistoli, G., & Pedretti, A. (2023). MetaSpot: a general approach for recognizing the reactive atoms undergoing metabolic reactions based on the MetaQSAR database. <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 24(13), 11064.
Pedretti, A., Vittorio, S., Sabato, E. , Vistoli, G., & Mazzolari, A. (2023). The VEGA web service: multipurpose online tools for molecular modelling and docking analyses. <i>Molecular Informatics</i> , 42(7), 2300018.
Pavletic, P., Semeano, A., Yano, H., Bonifazi, A., Giorgioni, G., Piergentili, A., Quaglia W., Sabbieti M. G., Agas D., Santoni G., Pallini R., Ricci-Vitiani, L., Sabato E. , Vistoli G., & Del Bello, F. (2022). Highly potent and selective dopamine D4 receptor antagonists potentially useful for the treatment of glioblastoma. <i>Journal of Medicinal Chemistry</i> , 65(18), 12124-12139.
Lammi, C., Bartolomei, M., Bollati, C., Cecchi, L., Bellumori, M., Sabato, E. , ... & Arnoldi, A. (2021). Phenolic extracts from extra virgin olive oils inhibit dipeptidyl peptidase IV activity: In vitro, cellular, and in silico molecular modeling investigations. <i>Antioxidants</i> , 10(7), 1133.

Atti di convegni
The Department's green heart, from the Botanic Garden to ethnobotany / M. Bottoni, F. Milani, G. Baron, F. Gado, E. Sabato , L. Colombo, P. Sira Colombo, P. Bruschi, G. Vistoli, G. Aldini, C. Giuliani, G. Fico. (Intervento presentato al 3. convegno Research retreat DisFarM Insights tenutosi a Milano nel 2023)
MetaClass and MetaSpot: Machine Learning-based tools for metabolism prediction. / E. Sabato , P. Perazzoni, G. Vistoli, A. Mazzolari, A. Pedretti. BioExcel Summer School on Biomolecular Simulations 2023, Sardegna, 10-15 Settembre 2023 (poster)
MetaClass and MetaSpot: Machine Learning-based tools for metabolism prediction. / E. Sabato , P. Perazzoni, G. Vistoli, A. Mazzolari, A. Pedretti. 23rd European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationship, Heidelberg, 26-30 Settembre 2022, pag. 160 (poster)
Identification of novel potential B4GALT6 inhibitors through a large scale virtual screening / C. Papotto, E. Sabato , D. Lecca, C. Matera, M. De Amici, A. Pedretti, C.M.L. Dallanocce, G. Vistoli. (Intervento presentato al 21. convegno Merck Young Chemists' Symposium: November, 21 - 23 tenutosi a Rimini nel 2022)



ALTRE INFORMAZIONI

Programmi di modellistica molecolare: Amber, ChemAxon, Chimera, Discovery Studio Visualizer, Gold, Knime, LigandScout, Maestro, Modeller, MOE, NAMD, PLANTS, PyMOL, VegaZZ, VMD, Weka
CORRELATORE TESI DI LAUREA MAGISTRALE Studente: Agnese Pozzi. Relatore: Giulio Vistoli. Tesi: <i>In silico</i> and <i>in vitro</i> studies to identify potential inhibitors of SARS-CoV-2 NSP13 Anno Accademico: 2022/2023 Studente: Ludovica Bono. Relatore: Giulio Vistoli. Tesi: Meccanismo catalitico di UGT2B7: studi di <i>modelling</i> e simulazioni di dinamica molecolare Anno Accademico: 2021/2022
Membro della Divisione di Chimica Farmaceutica della Società Chimica Italiana (SCI)
Tutorato e lezioni nell'ambito del progetto 4EU+ "VirtChem": Lezioni (8h): VirtChem (febbraio 2022) - modellistica molecolare, dinamica molecolare, virtual screening Lezioni (8h): VirtChem (febbraio 2023) - modellistica molecolare, dinamica molecolare, virtual screening Tutorato VirtChem (ottobre 2021-febbraio 2022) e VirtChem2 (ottobre 2023-febbraio 2024) - modellistica molecolare, docking molecolare, campagne di virtual screening

Le dichiarazioni rese nel presente curriculum sono da ritenersi rilasciate ai sensi degli artt. 46 e 47 del DPR n. 445/2000.

Il presente curriculum, non contiene dati sensibili e dati giudiziari di cui all'art. 4, comma 1, lettere d) ed e) del D.Lgs. 30.6.2003 n. 196.

RICORDIAMO che i curricula **SARANNO RESI PUBBLICI** sul sito di **Ateneo** e pertanto si prega di non inserire dati sensibili e personali. Il presente modello è già precostruito per soddisfare la necessità di pubblicazione senza dati sensibili.

Si prega pertanto di **NON FIRMARE** il presente modello.

Luogo e data: Milano, 27 agosto 2024