

## ALLEGATO B

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n.1 posto di Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24, comma 3, lettera b) della Legge 240/2010 per il 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, (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 36 del 23/06/2023).

Codice concorso 5308.

### Angelica Mazzolari

## CURRICULUM VITAE

### INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	MAZZOLARI
NOME	ANGELICA
DATA DI NASCITA	21,03,1980

### 1. CURRICULUM DEGLI STUDI

- 6/02/2023                    **Abilitazione Scientifica Nazionale per la seconda fascia**  
Settore concorsuale: 03/D1-CHIMICA E TECNOLOGIE FARMACEUTICHE,  
TOSSICOLOGICHE E NUTRACEUTICO-ALIMENTARI  
Settore scientifico disciplinare: CHIM/08  
Intervallo di validità: 06/02/2023 -06/02/2033
- 21/12/2015                    **Dottore di Ricerca in Chimica del Farmaco**, presso l'Università degli Studi di Milano,  
discutendo una Tesi dal titolo "*In silico* approaches in drug design and development:  
applications to rational ligand design and metabolism prediction", preparata nel  
Drug Design Laboratory del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, sotto la  
supervisione del Prof. Giulio Vistoli.
- 2009                            **Abilitazione all'esercizio della professione di farmacista**, presso l'Università degli Studi  
di Milano (333/350).

**11/07/2008**      **Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche**, presso l'Università degli Studi di Milano, con il massimo dei voti, discutendo una tesi dal titolo: "È possibile predire la reattività metabolica degli esteri? Una risposta computazionale", preparata nel Drug Design Laboratory del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, sotto la supervisione dei Proff. Giulio Vistoli e Alessandro Pedretti.

**1999**              **Diploma di Maturità Classica** (votazione 97/100) presso il Liceo Classico Statale "Bonaventura Cavalieri" di Verbania (VB).

## 2. CURRICULUM PROFESSIONALE

### 2.1 ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA A LIVELLO UNIVERSITARIO IN ITALIA E ALL'ESTERO

**giu.2020 ad oggi**      **Ricercatore a tempo determinato di tipo A (RTD- A) del settore scientifico-disciplinare 03/D1, SSD CHIM/08**, presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche (DISFARM) dell'Università degli Studi di Milano.

**ago.2016 - mag.2020** **Assegno di ricerca (tipo A)**, presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche (DISFARM) dell'Università degli Studi di Milano, con un progetto dal titolo: "Sviluppo di un approccio integrato per la predizione del metabolismo umano di farmaci e xenobiotici", svolto nel Drug Design Laboratory del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, tutor: Prof. Giulio Vistoli, Prof. Alessandro Pedretti.

**gen. - lug. 2016**      **Attività di Ricerca sperimentale** presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche (DISFARM) dell'Università degli Studi di Milano, con progetti riguardanti la generazione di modelli computazionali predittivi delle reazioni metaboliche, svolti nel Drug Design Laboratory del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, tutor: Prof. Giulio Vistoli.

### 2.2 ATTIVITÀ PRECEDENTI ALL'ACQUISIZIONE DEL TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA

**gen. - lug. 2015**      **Attività di Ricerca sperimentale all'estero**, svolta nell'ambito del Dottorato, presso l'università di Cambridge, con un progetto riguardante la generazione di modelli di machine learning, svolto nel laboratorio diretto dal Prof. Andreas Bender, Centre for Molecular Informatics, Chemistry Department.

- 2012 - 2015**      **Dottoranda con borsa ministeriale** (XXVIII ciclo), presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche (DISFARM) dell'Università degli Studi di Milano, con un progetto riguardante lo sviluppo *in silico* di nuovi farmaci e lo studio e predizione delle reazioni metaboliche, svolto nel Drug Design Laboratory del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche.
- gen. - set. 2012**      **Attività di Ricerca sostenuta da un bando pubblico** presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche (DISFARM) dell'Università degli Studi di Milano, con un progetto riguardante la modellazione *in silico* dei recettori nicotinici e purinergici, svolto nel Drug Design Laboratory del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, tutor: Prof. Giulio Vistoli.  
  
(ID 691 Reg. 0278840 del 16/05/2012)
- 2008 - 2011**      **Attività di Ricerca in azienda**, presso EPO s.r.l. "Istituto Chimico Fitoterapico", via Stadera 19, 20141 Milano. Ricerca e sviluppo di nuovi estratti naturali, analisi HPLC, GC, spettrometria UV-visibile, progettazione di impianti pilota e attività di consulente per la soluzione di problemi tecnici nell'ambito dei reparti produttivi di estratti secchi, fluidi e molli.
- 2007 - 2008**      **Attività di Ricerca sperimentale**, presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche (DISFARM) dell'Università degli Studi di Milano, svolta nell'ambito della Tesi di Laurea, con un progetto riguardante lo studio *in silico* della reazione idrolitica catalizzata dalle carbossiesterasi umane, svolto nel Drug Design Laboratory del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche.

### **3. ATTIVITÀ DIDATTICA**

#### **3.1 ATTIVITÀ DIDATTICA A LIVELLO UNIVERSITARIO IN ITALIA O ALL'ESTERO**

##### **3.1.1 COMPITI ATTRIBUITI DAL DIPARTIMENTO**

- AA 2022 - 2023**      **Docente** dell'insegnamento "**Hpc@unimi: indaco for drug discovery and development**" nell'ambito del corso di **Dottorato in Scienze farmaceutiche**. Lezioni frontali in lingua inglese (2 ore).
- AA 2022 - 2023**       **Titolare** dell'unità didattica "**Data Modelling in Biotechnology**" dell'insegnamento "**Bioinformatics and molecular modelling**", nell'ambito del corso di laurea Magistrale in Biotecnologie del farmaco. Lezioni frontali in lingua inglese (24 ore. 3CFU).

AA 2021 - 2022 **Titolare** dell'unità didattica **"Data Modelling in Biotechnology"** dell'insegnamento **"Bioinformatics and molecular modelling"**, nell'ambito del corso di laurea Magistrale in Biotecnologie del farmaco. Lezioni frontali in lingua inglese (24 ore. 3CFU).

AA 2020 - 2021 **Titolare** dell'unità didattica **"Data Modelling in Biotechnology"** dell'insegnamento **"Bioinformatics and molecular modelling"**, nell'ambito del corso di laurea Magistrale in Biotecnologie del farmaco. Lezioni frontali in lingua inglese (24 ore. 3CFU).

### 3.1.2 CORSI A CONTRATTO IN ATENEO

AA 2018 - 2019 **Professore a contratto** dell'unità didattica di laboratorio **"Laboratorio di Analisi Quantitativa"** dell'insegnamento **"Principi di analisi farmaceutica quantitativa"**, nell'ambito del corso di Laurea in Farmacia. Esercitazioni in laboratorio (32 ore, 2CFU).

AA 2016 - 2017 **Professore a contratto** dell'unità didattica di laboratorio **"Laboratorio di Analisi Qualitativa"** dell'insegnamento **"Chimica e Analisi Fitofarmaceutica"**, nell'ambito del corso di Laurea in Scienze e Tecnologie Erboristiche. Esercitazioni in laboratorio (32 ore, 2CFU).

### 3.1.3 SEMINARI

Dall'AA 2016 - 2017 **Seminario** (2 ore) dal titolo **"Proteochemometric Modelling"**, presso l'Università degli Studi di Milano, inserito nell'insegnamento **"Metodologie Avanzate in Chimica Farmaceutica"**, nell'ambito del corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.

AA 2018 - 2019 **Seminario** (1 ora) dal titolo **"Sites of Metabolism Prediction"**, presso l'Università di Vienna.

### 3.2 PARTECIPAZIONE A COMMISSIONE D'ESAME

3/02/2022: **membro della commissione di esame per il conferimento del titolo di Dottore di Ricerca** in Scienze Chimiche, Biologiche e Ambientali, curriculum Scienze Chimiche, XXXIV ciclo, presso l'Università degli Studi di Milano Bicocca (nomina con decreto rettorale n. 0141854/21 del 23/11/2021)

Dal 2012 ad oggi: **membro delle commissioni per gli esami di Laurea** in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche, Farmacia e Biotecnologie del Farmaco, presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche (DISFARM) dell'Università degli Studi di Milano.

Inoltre, la candidata è **membro di commissioni d'esame per diversi insegnamenti** presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche (DISFARM) dell'Università degli Studi di Milano:

- **Dall'AA 2020 – 2021** “Bioinformatics and molecular modelling”, Laura Magistrale in Biotecnologie del farmaco.
- **AA 2018 - 2019** “Principi di analisi farmaceutica quantitativa”, Laurea in Farmacia;
- **AA 2018 - 2019** “Chimica e Analisi Fitofarmaceutica”, Laurea in Scienze e Tecnologie Erboristiche

### 3.3 SUPERVISIONE DI STUDENTI E DOTTORANDI

Dal 2011 ad oggi, la candidata ha seguito personalmente le ricerche di studenti laureandi in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, Farmacia e Biotecnologie del Farmaco che hanno svolto attività sperimentale attinente alle proprie Tesi di Laurea presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università degli Studi di Milano.

#### 3.3.1 LAUREA MAGISTRALE IN CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE

##### supervisione come RELATORE

1. **Fabio Fapanni**, AA 2018-2019  
Titolo della Tesi: “Sviluppo di fingerprints atomici topologici e quanto-meccanici per la costruzione di modelli predittivi dei siti di glucuronidazione”
2. **Luca Sommaruga**, AA 2018-2019  
Titolo della Tesi: “MetaTREE: un nuovo database di alberi metabolici per la modellazione PCA/QSAR della reazione di coniugazione del glutatione”

##### supervisione come CORRELATORE

3. **Francesca Calabria**, AA 2018-2019  
Titolo della Tesi: “Predizione della reazione di coniugazione con il glutatione tramite modelli classificazionali QSAR”
4. **Ilaria Abbiati**, AA 2016-2017  
Titolo della Tesi: “Modellazione *in silico* della reazione di glucuronidazione mediante simulazioni di docking molecolare e virtual screening”
5. **Claudio Melini**, AA 2016-2017  
Titolo della Tesi: “Analisi *in silico* mediante studi di docking di potenziali siti allosterici sul recettore purinergico hP2X3”

6. **Antonio Di Paola**, AA 2016-2017  
Titolo della Tesi: “*In silico* predictive analysis of Sigma1 receptor ligands via Molecular Docking and Dynamics Simulations”
7. **Monica Oltolini**, AA 2015-2016  
Titolo della Tesi: “Predizione dell’attività enzimatica della UGT2B7 mediante simulazioni di docking molecolare e virtual screening”
8. **Elisa Varè**, AA 2015-2016  
Titolo della Tesi: “*In silico* analysis of putative allosteric binding sites on the human P2X3 purinergic receptor”
9. **Barbara Prinetti**, AA 2011-2012  
Titolo della Tesi: “Predizione *in silico* dell’attività delle esterasi: il caso delle paraoxonasi”

### 3.3.3 LAURA MAGISTRALE IN FARMACIA:

#### supervisione come CORRELATORE

10. **Pietro Perazzoni**, AA 2019/2020  
Titolo della Tesi: “M.I.M.I.R.: un approccio computazionale per la predizione metabolica”
11. **Moira Lupini**, AA 2016-2017  
Titolo della Tesi: Come variano le proprietà chimico-fisiche dei metaboliti nelle diverse generazioni? Una risposta chemioinformatica
12. **Valeria Zoni**, AA 2015-2016  
Titolo della Tesi: “*In silico* prediction of phase II metabolism: the case of UDP-glucuronosyltransferase conjugations”

### 3.3.4 LAURA MAGISTRALE IN BIOTECNOLOGIE FARMACEUTICHE, curriculum pharmacogenomics and precision therapeutics:

#### supervisione come RELATORE

13. **Silvia Multari**, AA 2022-2023  
Titolo della Tesi: “Predicting metabolic reactions with chemical language models”.
14. **Andrea Giuseppe Cavalli**, AA 2022-2023  
Progetto riguardante lo screening e il testing di nuovi peptidi attivi sulla dipeptidyl peptidase testing new active peptides (DPP4) estratti dai semi d’oliva, per il trattamento del diabete mellito.
15. **Leen Zaher**, AA 2022-2023  
Progetto riguardante la collezione dalla letteratura specializzata di un nuovo dataset di reazioni metaboliche e la generazione di nuovi modelli di predizione del metabolismo di farmaci e xenobiotici.

## supervisione come CORRELATORE

### 16. **Silvia Gervasoni**, AA 2015-2016

Titolo della Tesi: “*In silico* prediction of HDAC6 inhibition via Molecular Docking and Dynamics Simulations”

### 1. **Giacomo Lomazzi**, AA 2013-2014

2. Titolo della Tesi: “Predicting the metabolism by sulfotransferases: a probabilistic approach based on virtual screening strategies”.

## 3.3.5 DOTTORANDI:

1. Co-tutor della **Dott.ssa Emanuela Sabato**, dottorato in Scienze Farmaceutiche, XXXVII ciclo, presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche (DISFARM) dell’Università degli Studi di Milano. Titolo del progetto: “Artificial intelligence (AI) approaches in drug discovery: development and validation of new strategies in virtual screening campaigns”
2. Supporto all’attività di ricerca della **Dott.ssa Silvia Gervasoni**, dottorato in Scienze Farmaceutiche, XXXIII ciclo, presso il Dipartimento di Scienze Farmaceutiche (DISFARM) dell’Università degli Studi di Milano. Titolo del progetto: “Development and validation of computational approaches to study and characterize metalloproteins”.

## 4. ATTIVITÀ DI RICERCA

### 4.1 METRICA DELLE 14 PUBBLICAZIONI SELEZIONATE

Le 14 pubblicazioni selezionate raggiungono i seguenti indici bibliometrici (dati aggiornati al 23 Luglio 2023, fonte scopus):

IF totale	IF medio	Citazioni totali	Citazioni medie
81.915	5.851	222	16

### 4.2 RAZIONALE DELLE 14 PUBBLICAZIONI SELEZIONATE

La candidata ha svolto la sua attività di ricerca in ambito accademico nel campo della chimica farmaceutica **computazionale**, con riferimento sia a studi di simulazione di interazioni ligando-recettore, che coinvolgono anche la generazione di modelli tridimensionali della struttura della proteina target, sia a studi chemometrici, con l’applicazione di modelli statistici e di machine learning più propriamente focalizzati sull’universo chimico delle molecole potenziali farmaci.

L'intera attività scientifica della candidata, ed in particolare le 14 pubblicazioni selezionate per la presente procedura di valutazione, consentono di enucleare alcune principali tematiche di ricerca, che possono essere così schematizzate:

- ricerche riguardanti lo studio e la predizione delle reazioni metaboliche di farmaci e xenobiotici e dei fenomeni di disintossicazione;
- ricerche di carattere metodologico ed applicativo, focalizzate sullo sviluppo di nuove strategie per il miglioramento delle prestazioni degli algoritmi predittivi;
- ricerche di tipo structure-based, applicate al drug design per nuovi ligandi di potenziale interesse terapeutico che agiscono su recettori noti target biologici.

#### 4.2.1 RICERCHE RIGUARDANTI IL METABOLISMO E LA TOSSICITÀ

Questa tematica rappresenta il principale argomento di ricerca della candidata e tutte le pubblicazioni che ne sono seguite, dal progetto di Tesi di Laurea ad oggi, sono frutto dell'estesa collaborazione con il Prof. Bernard Testa dell'Università di Losanna. La predizione delle reazioni metaboliche e dei fenomeni di tossicità ha lo scopo di migliorare l'efficienza nella selezione delle molecole più promettenti durante tutte le fasi del processo di sviluppo del farmaco, prevenendo i rischi derivanti dalla scelta di molecole con profili farmacocinetici sfavorevoli, che sono considerati una delle principali cause di fallimento nella ricerca farmaceutica.

La predizione del metabolismo ha riguardato inizialmente la generazione di modelli QSAR di regressione applicati alla predizione dell'attività idrolitica dell'enzima carbossiesterasi umano. Per lo studio riportato nella **nota 14**, in particolare, è stato anche ottenuto il modello per omologia della carbossiesterasi 2 (hCES2), della quale tutt'ora non è disponibile nessun cristallo risolto, e sono state condotte delle simulazioni di dinamica molecolare sulla tasca catalitica di substrato e prodotto della reazione di idrolisi.

In seguito, la tematica è stata affrontata in modo più generale e approfondito, nell'ambito di un progetto che si propone la generazione di modelli globali della predizione delle biotrasformazioni e che è partito con la compilazione di un database di reazioni metaboliche che rappresenta la fonte di dati per tutti i successivi modelli. La **nota 8** riporta la descrizione di questo database, denominato MetaQSAR, e dell'interfaccia grafica sviluppata per gestirlo e implementata nel programma VEGA ZZ, sviluppato internamente al nostro laboratorio. Il lavoro di compilazione, svolto dal nostro gruppo di ricerca sotto la supervisione del Prof. Testa, si avvale di una meta-analisi curata manualmente della letteratura scientifica specializzata degli ultimi anni. Questo ha permesso di raggiungere elevati standard in termini di accuratezza dei dati raccolti, rendendo il database una risorsa preziosa per gli studi di metabolismo in ambito accademico. Accanto alla qualità dei dati, anche la loro organizzazione è stata curata con la creazione di un nuovo sistema di classificazione delle biotrasformazioni di farmaci e xenobiotici, che consiste in 3 classi principali, 28 classi e 101 sottoclassi di reazioni metaboliche.

Questi dati sono stati già utilizzati per diversi studi basati sull'applicazione di avanzate tecniche di machine learning, tra i quali i cinque selezionati, che consistono in due principali tipi di applicazioni: la generazione di modelli predittivi del verificarsi di una specifica classe di reazioni metaboliche e la generazione di un sistema di predizione che includa contemporaneamente tutte le principali classi di reazioni. Nel primo caso, la candidata ha sviluppato e validato modelli di machine learning per la corretta classificazione dei substrati delle due principali reazioni di fase 2 del metabolismo, sia in termini di frequenza, sia per la varietà dei gruppi funzionali potenzialmente implicati dalla reazione: la coniugazione con l'acido glucuronico e la coniugazione con il glutatione (**nota 7 e nota 3**, rispettivamente). I modelli generati rappresentano un importante contributo alla ricerca, sia per la carenza di modelli predittivi di queste importanti

biotrasformazioni, coinvolte in processi di eliminazione dei metaboliti tossici, sia per le prestazioni predittive raggiunte. Per quanto riguarda la generazione di sistemi di predizione globale delle diverse reazioni metaboliche, sono riportati tre studi. Nel primo (**nota 2**) è descritto lo sviluppo di un software denominato MetaClass che funziona come script all'interno del programma VEGA ZZ e si avvale dei descrittori molecolari internamente calcolati e dei modelli di machine learning importati dal programma WEKA. Questo software ha importanza sia come metodo di classificazione dei substrati delle principali classi di reazioni metaboliche, sia semplicemente come studio comparato delle performance predittive che si possono raggiungere per le relative classi di reazione. MetaClass è disponibile gratuitamente in ambito accademico (<https://doi.org/10.5281/zenodo.5128531>)

Il secondo studio (**nota 5**) è stato svolto in collaborazione con il gruppo di ricerca coordinato dal Prof Johannes Kirchmair e riguarda lo sviluppo di un metodo di predizione dei siti di metabolismo che è in grado di riconoscere sulla molecola input i siti reattivi più probabilmente oggetto di una generica reazione metabolica (icosidetti "siti di metabolismo"). La terza versione di questo software, denominata FAME 3, è la prima interamente basata sui dati contenuti in MetaQSAR e presenta notevoli vantaggi rispetto alle versioni precedenti: raggiunge prestazioni predittive migliori ed è in grado di contemplare sia reazioni di ossidoriduzione, sia di idrolisi, sia di coniugazione. Anche Fame 3 è disponibile gratuitamente in ambito accademico (<https://nerdd.zbh.uni-hamburg.de/fame3>).

Anche l'ultimo studio (**nota 1**) riguarda la predizione dei siti di metabolismo e si è avvalso degli stessi dataset estratti da MetaQSAR e sfruttati per generare i modelli di MetaClass, con la differenza che in questo caso, tramite l'utilizzo di opportuni descrittori atomici, sono indentificati precisamente i siti di metabolismo delle diverse sottoclassi di reazioni. Rispetto a FAME 3, quindi, non viene predetto solo l'atomo reattivo ma anche la sottoclasse di reazione coinvolta. L'approccio, denominato MetaSpot, è disponibile come script del programma VEGA ZZ.

Per quanto riguarda le ricerche sui processi di tossicità, oltre alla **nota 6** coinvolta nella tematica 2, è stato condotto un altro studio in collaborazione con il gruppo di ricerca coordinato dal Prof. Aldini che riguarda il recettore RAGE (Receptor for Advanced Glycation Endproducts). Tale recettore è membro della superfamiglia delle immunoglobuline, mediatore di tossicità per interazione con composti di glicazione avanzata (AGE) e addotti proteici di lipossidazione (ALE). Il contributo computazionale riportato nella **nota 11** ha fornito una interpretazione razionale dell'interazione tra composti AGE e i residui target sul dominio VC1 del recettore RAGE.

#### 4.2.2 RICERCHE DI CARATTERE METODOLOGICO-APPLICATIVO

Le pubblicazioni selezionate per questa tematica riguardano lo sviluppo di nuove strategie che consentano l'ottimizzazione delle tecniche di simulazione comunemente usate negli studi computazionali. Tali strategie sono state principalmente applicate nel campo della predizione del metabolismo, pertanto rappresentano anche il punto di incontro tra le tematiche 1 e 2.

La strategia sfruttata nella **nota 10** si colloca nell'ambito degli studi structure-based e consiste nell'innovativo concetto di "binding space", secondo il quale la tecnica del docking molecolare, simulazione dell'interazione ligando-target tipicamente limitata da un carattere di staticità, viene arricchita di un termine che consente di esplorare sia la flessibilità che il ligando mantiene durante il processo di riconoscimento nella tasca di legame, sia la possibilità di *binding mode* multipli. Questo risultato è ottenuto superando il concetto di "posa migliore" e includendo nello studio tutte le pose generate dalla simulazione, attraverso l'utilizzo di descrittori quali media, range e sensibilità delle relative funzioni di score. Questa strategia è stata testata in uno studio di docking sull'enzima butirrilcolinesterasi allo scopo di sviluppare modelli predittivi del metabolismo idrolitico catalizzato da tale enzima.

Due articoli riportano un metodo innovativo per la generazione di modelli classificazionali che consiste nell'utilizzo di funzioni lineari di *consensus* per l'ottimizzazione del fattore di arricchimento degli studi di virtual screening. Questo algoritmo, denominato EFO (*Enrichment Factor Optimization*), è implementato nel nostro programma VEGA ZZ. Il metodo è stato applicato e validato con risultati soddisfacenti sia su descrittori molecolari, nell'ambito di studi chemometrici per la predizione della formazione di metaboliti reattivi (**nota 9**), sia su score ottenuti con simulazioni di docking e virtual screening, nell'ambito degli studi structure-based per la predizione dell'attività dei dataset *DUD* (**nota 6**).

#### 4.2.3 RICERCHE DI STRUCTURE-BASED DRUG DESIGN

Questa tematica comprende diversi lavori di structure-based drug design che hanno come oggetto noti target di interesse terapeutico e si propongono di razionalizzare l'interazione ligando-recettore creando modelli in grado di progettare nuovi analoghi dotati di un migliore profilo di attività e di selettività. Tre pubblicazioni più rappresentative sono state scelte a titolo esemplificativo.

La **nota 13** riporta uno studio riguardante il recettore nicotinico  $\alpha_4\beta_2$  umano, il sottotipo nicotinico più abbondante nel cervello, che ha come obiettivo la progettazione razionale di nuovi ligandi ciclopropanici strutturalmente riferibili alla sazetidina, potenzialmente coinvolti in attività antidepressiva. Il dominio di legame è stato ottenuto tramite modellazione per omologia e validato da uno studio di docking su un set di derivati della sazetidina-A, selezionati dalla letteratura. Lo studio riportato nella **nota 12** riguarda i recettori della serotonina, in particolare il noto sottotipo 5HT<sub>1A</sub> umano, implicato in diverse patologie a carico del sistema nervoso. Questa ricerca ha avuto come oggetto l'estensione di studi di relazione struttura-attività volti a migliorare il profilo di selettività di molecole attive e il contributo computazionale è consistito in simulazioni di docking molecolare su modelli ottenuti per omologia che hanno permesso di razionalizzare i dati sperimentali. La **nota 4** riporta, in fine, un lavoro di structure-based virtual screening per il riposizionamento di farmaci noti come potenziali ligandi del recettore muscarino M2 umano. Il protocollo delle simulazioni di docking molecolare si è avvalso delle strategie già sviluppate internamente note come concetto di "binding space" e algoritmo EFO descritte nelle **note 10 e 9**, rispettivamente. Lo studio ha permesso di identificare un nuovo modulatore allosterico molto potente, il dequalinium, capostipite potenziale di una serie di nuove molecole attive, e altri ligandi interessanti caratterizzati da una struttura bis-cationica.

#### 4.2 PRODUZIONE SCIENTIFICA TOTALE

Dal 2009 ad oggi, l'attività scientifica della candidata si è concretizzata nella tesi di Laura, la tesi di Dottorato, **41 pubblicazioni** su riviste internazionali peer review e indicizzate, di cui **8** come primo autore, **9** come secondo, **2** come corresponding author, **1** come ultimo autore, e **1** capitolo di libro.

La candidata ha tenuto **7 comunicazioni orali** a congressi di rilevanza internazionale, di cui **3 come keynote su invito**.

#### 4.2.1 INDICI BIBLIOMETRICI

La candidata raggiunge i seguenti indici bibliometrici (dati aggiornati al 25 febbraio 2022, fonte scopus):

H index	IF totale	IF medio	Citazioni totali	Citazioni medie
15	184.781	4.738	518	13.3

#### 4.2.2 ELENCO COMPLETO DEGLI ARTICOLI SU RIVISTE INTERNAZIONALI PEER REVIEW

1. [A. Mazzolari](#), P. Perazzoni, E. Sabato, F. Lunghini, A. Beccari, A. Vistoli, A. Pedretti, "MetaSpot : A General Approach for Recognizing the Reactive Atoms Undergoing Metabolic Reactions Based on the MetaQSAR Database," *Int. J. Mol. Sci.*, vol 24, **2023** (IF=5.6).
2. A. Artasensi, [A. Mazzolari](#), A. Pedretti, G. Vistoli, and L. Fumagalli, "Factor and Therapeutic Options," *Molecules*, vol 28, **2023** (IF=4.927).
3. A. Pedretti, S. Vittorio, E. Sabato, G. Vistoli, and [A. Mazzolari](#), "The VEGA web service: multipurpose online tools for molecular modelling and docking analyses," *Mol. Inform.*, no. May, pp. 1–5, **2023** (IF=4.05)
4. T. A. Soares, A. Nunes-Alves, [A. Mazzolari](#), F. Ruggiu, G. W. Wei, and K. Merz, "The (Re)-Evolution of Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) Studies Propelled by the Surge of Machine Learning Methods," *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 62, no. 22, pp. 5317–5320, **2022** (IF=6.162).
5. L. Regazzoni et al., "Cyclo(His-Pro) Exerts Protective Carbonyl Quenching Effects through Its Open Histidine Containing Dipeptides," *Nutrients*, vol. 14, no. 9, **2022** (IF=5.9).
6. J. Li et al., "Hempseed (Cannabis sativa) Peptide H3 (IGFLIIWV) Exerts Cholesterol-Lowering Effects in Human Hepatic Cell Line," *Nutrients*, vol. 14, no. 9, **2022** (IF=5.9).
7. A. Pedretti, [A. Mazzolari](#), S. Gervasoni, L. Fumagalli, and G. Vistoli, "The VEGA suite of programs: An versatile platform for cheminformatics and drug design projects," *Bioinformatics*, vol. 37, no. 8, pp. 1174–1175, **2021** (IF=6.937).
8. [A. Mazzolari](#), A. Scaccabarozzi, G. Vistoli, and A. Pedretti, "Metaclass, a comprehensive classification system for predicting the occurrence of metabolic reactions based on the metaqsar database," *Molecules*, vol. 26, no. 19, **2021** (IF=4.412).
9. C. De Bruyn Kops, M. Šícho, [A. Mazzolari](#), and J. Kirchmair, "GLORYx: Prediction of the Metabolites Resulting from Phase 1 and Phase 2 Biotransformations of Xenobiotics," *Chem. Res. Toxicol.*, vol. 34, no. 2, pp. 286–299, **2021** (IF=3.379).
10. [A. Mazzolari](#), L. Sommaruga, A. Pedretti, and G. Vistoli, "MetaTREE, a novel database focused on metabolic trees, predicts an important detoxification mechanism: The glutathione conjugation," *Molecules*, vol. 26, no. 7, **2021** (IF=4.412).

11. A. Nunes-Alves, [A. Mazzolari](#), and K. M. Merz, "What Makes a Paper Be Highly Cited? 60 Years of the Journal of Chemical Information and Modeling," *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 60, no. 12, pp. 5866–5867, **2020** (IF=4.956).
12. A. Pedretti, [A. Mazzolari](#), S. Gervasoni, and G. Vistoli, "Tree2c: A flexible tool for enabling model deployment with special focus on cheminformatics applications," *Appl. Sci.*, vol. 10, no. 21, pp. 1–8, **2020** (IF=2.679).
13. R. Matucci, C. Bellucci, M.V. Martino, M. Nesi, D. Manetti, J. Welzel, U. Bartz, J. Holze, C.Tränkle, K.Mohr, [A. Mazzolari](#), *et al.*, "Carbachol dimers with primary carbamate groups as homobivalent modulators of muscarinic receptors," *Eur. J. Pharmacol.*, vol. 883, no. March, p. 173183, **2020** (IF=4.432).
14. [A. Mazzolari](#), S. Gervasoni, A. Pedretti, L. Fumagalli, R. Matucci, and G. Vistoli, "Repositioning dequalinium as potent muscarinic allosteric ligand by combining virtual screening campaigns and experimental binding assays," *Int. J. Mol. Sci.*, vol. 21, no. 17, pp. 1–17, **2020** (IF=6.132).
15. [A. Mazzolari](#), A. Nunes-Alves, H. A. Wahab, R. E. Amaro, Z. Cournia, and K. M. Merz, "Impact of the Journal of Chemical Information and Modeling Special Issue on Women in Computational Chemistry," *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 60, no. 7, pp. 3328–3330, **2020** (IF=4.956).
16. A. Tramarin, M. Naldi, G. Degani, L. Lupu, P. Wiegand, [A. Mazzolari](#), A. Altomare, G. Aldini, L. Popolo, G. Vistoli, *et al.* "Unveiling the molecular mechanisms underpinning biorecognition of early-glycated human serum albumin and receptor for advanced glycation end products," *Anal. Bioanal. Chem.*, vol. 412, no. 18, pp. 4245–4259, **2020** (IF=4.142).
17. M. Šícho, C. Stork, [A. Mazzolari](#), C. de Bruyn Kops, A. Pedretti, B. Testa, G. Vistoli, D. Svozil, J. Kirchmair "FAME 3: Predicting the Sites of Metabolism in Synthetic Compounds and Natural Products for Phase 1 and Phase 2 Metabolic Enzymes," *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 59, no. iii, pp. 3400–3412, **2019** (IF=4.956).
18. [A. Mazzolari](#), A. M. Afzal, A. Pedretti, G. Vistoli, B. Testa, A. Bender, "Prediction of UGT-mediated metabolism using the curated MetaQSAR database", *ACS Med. Chem. Lett.*, vol. 10, no. 4, pp. 633–638, **2019** (IF=4.345).
19. A. Pedretti, [A. Mazzolari](#), S. Gervasoni, and G. Vistoli, "Rescoring and Linearly Combining: A Highly Effective Consensus Strategy for Virtual Screening Campaigns," *Int. J. Mol. Sci.*, vol. 20, no. 9, p. 2060, **2019** (IF=5.924).
20. [A. Mazzolari](#), G. Vistoli, B. Testa, A. Pedretti, "Prediction of the formation of reactive metabolites by a novel classifier approach based on enrichment factor optimization (EFO) as implemented in the VEGA program," *Molecules*, vol. 23, no. 11, pp. 1–15, **2018** (IF=4.412).
21. A. Pedretti, [A. Mazzolari](#), G. Vistoli, S. Farmaceutiche, F. Farmacia, V. L. Mangiagalli, "Warp Engine, a Flexible Platform for Distributed Computing Implemented in the VEGA Program and Specially Targeted for Virtual Screening Studies", *J. Chem. Inf. Model.*, **2018** (IF=4.956).
22. A. Pedretti, [A. Mazzolari](#), G. Vistoli, B. Testa, "MetaQSAR: An Integrated Database Engine to Manage and Analyze Metabolic Data", *J. Med. Chem.*, vol. 61, no. 3, pp. 1019–1030, Feb. **2018**, (IF=7.446).
23. G. Vistoli, M. Colzani, [A. Mazzolari](#), E. Gilardoni, C. Rivaletto, M. Carini, G. Aldini, "Quenching activity of carnosine derivatives towards reactive carbonyl species: Focus on  $\alpha$ -(methylglyoxal) and

- $\beta$ -(malondialdehyde) dicarbonyls", *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, vol. 492, no. 3, pp. 487–492, **2017** (IF=3.575).
24. G. Vistoli, A. Mazzolari, B. Testa, A. Pedretti, "Binding Space Concept: A New Approach to Enhance the Reliability of Docking Scores and Its Application to Predicting Butyrylcholinesterase Hydrolytic Activity", *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 57, no. 7, pp. 1691–1702, **2017** (IF=4.956).
  25. A. Mazzolari, C. Coppa, A. Altomare, G. Degani, G. Vistoli, "Data from docking simulations to develop an efficient strategy able to evaluate the interactions between RAGE and MDA-induced albumin adducts", *Data Br.*, vol. 12, pp. 656–661, **2017**.
  26. K. K. Wong, L. H. Mervin, A. Mazzolari, A. Bender, N. S. Yaacob, "Towards the mode of action of *Strobilanthes crispus* through integrated computational and experimental analyses", *J. Plant Biochem. Biotechnol.*, vol. 26(4), pp. 451-466 **2017** (IF=1.175).
  27. G. Baron, A. Altomare, L. Regazzoni, V. Redaelli, S. Grandi, A. Riva, P. Morazzoni, A. Mazzolari, M. Carini, G. Vistoli, G. Aldini, "Pharmacokinetic profile of bilberry anthocyanins in rats and the role of glucose transporters: LC–MS/MS and computational studies", *J. Pharm. Biomed. Anal.*, pp. 1–10, **2017** (IF=3.395).
  28. G. Degani, A. Altomare, M. Colzani, C. Martino, A. Mazzolari, G. Fritz, G. Vistoli, L. Popolo, G. Aldini, "A capture method based on the VC1 domain reveals new binding properties of the human receptor for advanced glycation end products (RAGE)", *Redox Biol.*, vol. 11, no. November 2016, pp. 275–285, **2016** (IF=11.799).
  29. F. Del Bello, A. Bonifazi, M. Giannella, G. Giorgioni, A. Piergentili, R. Petrelli, C. Cifani, M. V. Micioni Di Bonaventura, T. M. Keck, A. Mazzolari, G. Vistoli, A. Cilia, E. Poggesi, R. Matucci, W. Quaglia, "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-HT1A receptor over  $\alpha$ 1-adrenoceptor and D2-like receptor subtypes", *Eur. J. Med. Chem.*, vol. 125, pp. 233–244, **2016** (IF=6.514).
  30. G. Vistoli, M. Colzani, A. Mazzolari, D. De Maddis, G. Grazioso, A. Pedretti, M. Carini, G. Aldini, "Computational approaches in the rational design of improved carbonyl quenchers: focus on histidine containing dipeptides", *Future Med. Chem.*, vol. 8, no. 14, 1721–37, **2016** (IF=3.808).
  31. A. Pedretti, C. Granito A. Mazzolari, G. Vistoli "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", *Molecular Informatics*, vol. 35(8-9), pp. 424-433, **2016** (IF=3.353).
  32. Regazzoni, S. Colombo, A. Mazzolari, G. Vistoli, M. Carini "Serum albumin as a probe for testing the selectivity of irreversible cysteine protease inhibitors: The case of vinyl sulfones", *J Pharm Biomed Anal*, vol. 124, pp. 294–302, **2016** (IF=3.935).
  33. R. Matucci, M. Nesi, M.V. Martino, C. Bellucci, D. Manetti, E. Ciuti, A. Mazzolari, S. Dei, L. Guandalini, E. Teodori, G. Vistoli, M. N. Romanelli "Carbachol dimers as homobivalent modulators of muscarinic receptors", *Biochem Pharmacol.*, vol.108, pp. 90-101, **2016** (IF=5.858).
  34. D. Tronino, R. Russo, C. Ostacolo, A. Mazzolari, C. De Caro, C. Avagliano, S. Laneri, G. La Rana, A. Sacchi, F. Della Valle, G. Vistoli, A. Calignano "Improvement of topical palmitoylethanolamide anti-inflammatory activity by pegylated prodrugs", *Mol. Pharm*, vol. 12, pp. 294-302, **2015** (IF=4.939).
  35. Pedretti, A. Mazzolari, C. Ricci, G. Vistoli, "Enhancing the Reliability of GPCR Models by Accounting for Flexibility of Their Pro-Containing Helices: The Case of the Human mAChR1 Receptor", *Molecular Informatics*, vol. 34, pp. 2016-27, **2015** (IF = 3.353).

36. F. Del Bello, A. Bonifazi, W. Quaglia, A. Mazzolari, E. Barocelli, S. Bertoni, R. Matucci, M. Nesi, A. Piergentili, G. Vistoli. "Mode of interaction of 1,4-dioxane agonists at the M2 and M3 muscarinic receptor orthosteric sites", *Bioorg Med Chem.*, vol. 24, pp. 3255–59, **2014** (IF=3.641).
37. H.K. Zhang, J.B. Eaton, L.F. Yu, M. Nys, A. Mazzolari, R. van Elk, A.B. Smit, V. Alexandrov, T. Hanania, E. Sabath, A. Fedolak, D. Brunner, R.J. Lukas, G. Vistoli, C. Ulens, A.P. Kozikowski "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", *J Med Chem.*, vol. 55, pp. 8028 – 8037, **2012** (IF=7.446).
38. G. Nicotra, S. Vicentini, A. Mazzolari. "Ficus Carica." *Nutrafoods*, vol. 9, pp. 27-30.
39. G. Vistoli, A. Pedretti, A. Mazzolari, B. Testa "Homology modeling and metabolism prediction of human carboxylesterase-2 (hCES2) using docking analyses by GriDock - a parallelized tool based on AutoDock 4.0", *J. Comp.-Aided Mol. Des.*, vol. 24, pp. 771-87, 2010 (IF = 3.686).
40. G. Vistoli, A. Pedretti, A. Mazzolari, B. Testa "In silico prediction of human carboxylesterase-1 (hCES1) metabolism combining docking analyses and MD simulations", *Bioorg Med Chem.*, vol. 18, pp. 320-9, **2010** (IF = 3.641).
41. G. Vistoli, A. Pedretti, A. Mazzolari, C. Bolchi, B. Testa "Influence of ionization state on the activation of temocapril by hCES1: a molecular-dynamics study", *Chem Biodivers.*, vol. 6, pp. 2092-2100, **2009** (IF = 2.408).

#### 4.2.3 CAPITOLI LIBRO

Vistoli G., Pedretti A., Mazzolari A., Testa B. "Approaching pharmacological space: Events and components" *Methods in Molecular Biology*, 1800, pp. 245-274, **2018**.

#### 4.2.4 ATTI DI CONVEGNO

1. E. Sabato, P. Pierazzoni, G. Vistoli, A. Mazzolari, A. Pedretti, "MetaClass and MetaSpot: Machine Learning tool for metabolism prediction" Glicated human serum albumin interaction with RAGE ectodomain", **23rd European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationship (23rd EuroQSAR)**, Heidelberg, Germania, 26-30 Settembre **2022**.
2. A. Tramarin, M. Naldi, G. Degani, E. Fabini, L. Lupu, P. Wiegand, A. Mazzolari, G. Aldini, L. Popolo, G. Vistoli, M. Przybylski, M. Bartolini, "Glicated human serum albumin interaction with RAGE ectodomain", **XXVI National Meeting on Medicinal Chemistry NMMC 2019**, Università Cattolica del Sacro Cuore, Milano, 16-19 luglio **2019**.
3. S. Gervasoni, A. Mazzolari, F. Morani, G. Vistoli, "Structural insight into the effect of saccin mutation by MD simulation studies", **VI Computationally Driven Drug Discovery Meeting**, Università Cattolica del Sacro Cuore, Roma, 28-29 marzo **2019**.

4. C. de Bruyn Kops, M. Šicho, W. Plonka, A. Mazzolari, N. Kochev, N. Jeliaskova, A. Pedretti, D. Svozil, B. Testa, G. Vistoli, J. Kirchmair "Machine learning models for the prediction of xenobiotic metabolism", **256<sup>th</sup> ACS National & Exposition**, Boston, Massachusetts, 19-23 agosto **2018**.
5. A. Mazzolari, A. Afzal, A. Pedretti, G. Vistoli, B. Testa, A. Bender, "Prediction of UGT metabolism using a Proteochemometric approach", **Lhasa Limited-Bender group meeting**, Leeds, United Kingdom, 11-12 gennaio **2017**. (Poster)
6. A. Pedretti, G. Vistoli, A. Mazzolari, B. Testa, "Prediction of metabolite toxicity by meta-analysis", **XIII National Meeting in Medicinal Chemistry**, Salerno, settembre 6-9 **2015**.
7. A. Mazzolari, A. Pedretti, C. Ricci, G. Vistoli "Enhancing the reliability of GPCR models by accounting for flexibility of their Pro-containing helices: the case of the human mAChR1 receptor ", **Nuove prospettive in chimica farmaceutica, VIII meeting**, Riccione, 9-11 giugno **2014**. (Poster)
8. A. Mazzolari, G. Vistoli, M. Lo Monte, H.Zhang, J. B. Eaton, Li-Fang Yu, M. Nys, R. van Elk, A. B. Smit, D. Brunner, R. J. Lukas, Chris Ulensc, A.P. Kozikowski "Combining X-ray crystal studies, homology modeling and docking simulations to design novel  $\alpha_4\beta_2$  ligands for use in depression", **3<sup>rd</sup> Computationally Driven Drug Discovery Meeting**, Genova, 4-6 febbraio **2013**. (Poster)
9. 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  $\alpha_4\beta_2$  ligands for use in depression", **XXI National Meeting on Medicinal Chemistry NMMC 2012**, Palermo, 17-20 luglio, **2012**.
10. A. Mazzolari, A. Pedretti, G. Vistoli, B. Testa "In silico prediction of metabolism by human carboxylesterases (hCES1 and hCES2) combining docking analyses and MD simulations", VI meeting "**Nuove prospettive in chimica farmaceutica**", Rimini, 15-17 aprile **2012**. (Poster)
11. G. Vistoli, A. Pedretti, A. Mazzolari, "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**, Zurigo, Svizzera, 8-11 febbraio **2009**.
12. A. Pedretti, A. Mazzolari, G. Vistoli, "VEGA ZZ: a versatile toolkit for drug design and protein modelling", **II Congreso de Físicoquímica Teórica y Computacional**, Choroni – Aragua, Venezuela, 2-4 dicembre **2008**.

### 4.3 ATTIVITÀ DI RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI E INTERNAZIONALI

#### 4.3.1 PRESENTAZIONI ORALI A CONGRESSI INTERNAZIONALI SU INVITO

1. A. Mazzolari, "Artificial intelligence in drug discovery: ML methods to predict drug metabolism and toxicity ", **Keynote speaker, IGSMIP international**, Advanced Research in Artificial Intelligence, Machine Learning and Cyber Security, Virtual webinar, 13 maggio **2023**.
2. A. Mazzolari, "MetaQSAR: an expert-curated database on sites of metabolism offers new avenues for phase II metabolism predictions ", **University of Vienna**, Vienna, 1 maggio **2019**.
3. A. Mazzolari, Avid M. Afzal, Alessandro Pedretti, Giulio Vistoli, Andreas Bender, Bernard Testa, "MetaQSAR: a manually curated database on sites of metabolism offers new avenues for metabolism prediction", **Keynote speaker, EuroQSAR 2018**, Thessaloniky, Grecia, 16-20 settembre **2018**.

#### 4.3.2 PRESENTAZIONI ORALI A CONGRESSI INTERNAZIONALI E NAZIONALI

4. A. Mazzolari, " Prediction of drug metabolism by Machine Learning methods", **Let's DISFARM**, Università degli studi di Milano, 27 Gennaio **2023**.
5. A. Mazzolari, "AI in metabolism and toxicity prediction to speed up drug discovery", **1<sup>st</sup> Industrial Conference on Artificial Intelligence and Health ICAIH 2019**, Palazzo Pirelli, Milano, 13-14 novembre **2019**.
6. A. Mazzolari, A. Afzal, M. Šicho, J. Kirchmair, A. Bender, B. Testa, A. Pedretti, G. Vistoli, "MetaQSAR and ligand-based methods for metabolism prediction", **VI Computationally Driven Drug Discovery Meeting**, Università Cattolica del Sacro Cuore, Roma, 28-29 marzo **2019**
7. A. Mazzolari, A. Pedretti, A. M. Afzal, B. Teta, A. Bender, G. Vistoli, "MetaQSAR as a source of data for accurately predicting UGT-mediated metabolism", **V Computationally Driven Drug Discovery Meeting**, IFOM, Milan, 16-17 novembre **2017**.
8. A. Mazzolari, A. Pedretti, A. M. Afzal, B. Teta, A. Bender, G. Vistoli, "Modelling of Glucuronidation Reactions in the MetaQSAR Database: Successful Strategies to Handle Unbalanced Data in Metabolism Prediction", **XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana**, Paestum, 10-14 settembre **2017**.

### 4.4 ATTIVITÀ EDITORIALE

#### 4.4.1 ATTIVITÀ DI REFERAGGIO

La candidata svolge attività di referaggio per le seguenti riviste interazionali peer review:

- **International Journal of Pharmaceutics** (IF = 5.875)
- **Frontiers in Chemistry** (IF = 5.221)
- **Journal of Medicinal Chemistry** (IF = 7.446)
- **Bioorganic & Medicinal Chemistry** (IF = 3.641)
- **Molecules** (IF = 4.412)
- **Computational and Structural Biotechnology Journal** (IF =6.155)

#### 4.4.2 ATTIVITÀ DI EDITOR

La candidata è membro dei seguenti editorial career board:

- **Journal of Chemical Information and Modelling Editorial Advisory Board (JCIM EAB).**  
Come tale, ha partecipato alla pubblicazione dell'Application Notes **Virtual Issue** intitolata: "Why read them?", consultabile al link: <https://pubs.acs.org/page/jcisd8/vi/ECBAppNotes.html>, oltre ad due **editoriali** (pubblicazione n. 32 e 38) e un **viewpoint** (pubblicazioni n. 28).
- **Molecules, Guest Editor di una Special Issue** intitolata "Data and Low-Data Tools for Artificial Intelligence in Medicinal Chemistry", consultabile al link [https://www.mdpi.com/journal/molecules/special\\_issues/artificial\\_intelligence\\_medical](https://www.mdpi.com/journal/molecules/special_issues/artificial_intelligence_medical)
- **Frontiers in Drug Discovery** (Review Editor for *In silico* Methods and Artificial Intelligence for Drug Discovery)

#### 4.5 ORGANIZZAZIONE, DIREZIONE E COORDINAMENTO DI GRUPPI E DI PROGETTI DI RICERCA NAZIONALI O INTERNAZIONALI O PARTECIPAZIONE AGLI STESSI

La dott.ssa Angelica Mazzolari ha fatto parte di gruppi di ricerca guidati da

- **Prof. Giulio Vistoli, Prof. Alessandro Pedretti**, University degli Studi di Milano. La collaborazione si è concretizzata fino ad ora in 36 pubblicazioni;
- **Prof. Andreas Bender**, Centre for Molecular Informatics, University of Cambridge, Chemistry Department, Cambridge (UK). Titolo del progetto: "Generation of machine learning models to predict human metabolism of drugs and xenobiotics". La collaborazione si è concretizzata fino ad ora nella pubblicazione n. 18;

Inoltre, ha collaborato e collabora correntemente con i gruppi di ricerca guidati da:

- **Prof. Bernard Testa**, Emeritus Professor, Lausanne University, CH-1015 Losanna, Svizzera. Estesa collaborazione riguardante la compilazione di un database di reazioni metaboliche e la generazione di un approccio integrato per la predizione del metabolismo umano di farmaci e xenobiotici, che si è concretizzata in 8 pubblicazioni (n. 17, n. 18, n. 20, n. 22, n. 24, n. 39, n. 40 e n.41);
- **Prof. Johannes Kirchmair**, University of Vienna. Titolo del progetto: "Development of Computational Models for Site of Metabolism and Metabolite Structure Prediction". La collaborazione si è concretizzata fino ad ora in due pubblicazioni (n. 9 e n. 17);

- **Prof. Giancarlo Aldini**, Università degli Studi di Milano, Dipartimento di Scienze Farmaceutiche (DISFARM). La collaborazione riguarda prevalentemente lo studio di meccanismi mediatori di tossicità e si è fino ad ora concretizzata in 5 pubblicazioni (n. 16, n. 23, n. 27, n. 28 e n. 30);
- **Pharmacelera**, azienda operante nel settore del Computer-Aided Drug Design, Barcellona, Spagna. La collaborazione riguarda l'impiego di nuovi descrittori atomici sviluppati da Pharmacelera in modelli di predizione delle reazioni metaboliche;
- **Dott.ssa Francesca Grisoni**, Eindhoven University of Technology". La collaborazione riguarda lo sviluppo di modelli di predizione delle reazioni metaboliche di farmaci e xenobiotici tramite applicazione di metodi di Deep Learning e Chemical Language Models, e si è concretizzata fino ad ora nella pubblicazione della tesi di Laurea n.13

Infine, ha partecipato ai seguenti progetti di ricerca:

- progetto di ricerca nell'ambito del Piano Nazionale di Ripresa e Resilienza (**PNRR**), tematica "Sviluppo di farmaci con tecnologia a RNA e terapia genica", spoke 7, dal titolo: "National Center for Gene Therapy and Drugs based on RNA Technology"

## **5. ATTIVITÀ ISTITUZIONALI, ORGANIZZATIVE E DI SERVIZIO**

- Dall' AA 2021 - 2022: membro del Collegio dei Docenti del corso di Laurea in Biotecnologie del farmaco, presso l'Università degli Studi di Milano;
- AA 2018 - 2019: membro del Collegio dei Docenti del corso di Laurea in Farmacia, presso l'Università degli Studi di Milano;
- AA 2016 - 2017: membro del Collegio dei Docenti del corso di Laurea in Scienze e Tecnologie Erboristiche, presso l'Università degli Studi di Milano.
- Dal 2018 al 2020: membro della RETE ASSEGNISTI UNIMI ed organizzatore del tavolo permanente di incontri con la direzione dell'Università degli Studi di Milano;
- Dal 2016 al 2020: rappresentante degli assegnisti in Consiglio di Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, presso l'Università degli Studi di Milano.

## 6. PARTECIPAZIONE A SOCIETÀ SCIENTIFICHE

La Dott.ssa Angelica Mazzolari è socia della SCI (Società Chimica Italiana) - Divisione di Chimica Farmaceutica.

## 7. LINGUE STRANIERE

Lingua inglese: conoscenza professionale completa.

## INTERRUZIONE DI CARRIERA

24 Maggio 2020 – 24 ottobre 2020: congedo per maternità.

Data

23/07/2023

Luogo

MILANO