

INFORMAZIONI PERSONALI

Gabriele Cruciani

Data di nascita: NON PERTINENTE AI FINI DELLA PUBBLICAZIONE SUL WEB

Nazionalità: NON PERTINENTE AI FINI DELLA PUBBLICAZIONE SUL WEB

Research identifier: NON PERTINENTE AI FINI DELLA PUBBLICAZIONE SUL WEB

 NON PERTINENTE AI FINI DELLA PUBBLICAZIONE SUL WEB

 NON PERTINENTE AI FINI DELLA PUBBLICAZIONE SUL WEB

 NON PERTINENTE AI FINI DELLA PUBBLICAZIONE SUL WEB
Breve descrizione del CV

Gabriele Cruciani è professore ordinario di Chimica Organica dal 2005 presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Perugia. Dal 2009 è responsabile del corso di "Cheminformatica" per gli studenti del corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche e "Progettazione molecolare" per il corso di laurea in Chimica. Nel 2015 ha tenuto il corso di "Biologia quantitativa" per la laurea magistrale in Biotecnologie Molecolari e Industriali e dal 2016 tiene il corso di "Chimica Organica 1" per la laurea triennale in Chimica. L'attività scientifica del prof. Cruciani è documentata da oltre 140 lavori scientifici, da 15 capitoli di libri e dalla produzione di un libro sui campi di interazione molecolare (Wiley-VCH Editor). Il prof. Cruciani è inoltre direttore scientifico di Molecular Discovery ltd e Molecular Horizon srl ed è il direttore della *human Cytochrome Consortium Initiative* (un consorzio di aziende farmaceutiche, quali Abbvie, Accelera, Astrazeneca, Novartis, Pfizer, Sanofi, Servier, che ha come fine ultimo quello di risolvere problematiche di metabolismo nella predizione del metabolismo umano). Il prof. Cruciani è membro nei consigli tecnici scientifici di molte aziende farmaceutiche, ha ottenuto diversi premi internazionali per la ricerca ed è incluso nella lista dei Top Italian Scientists.

EDUCAZIONE

1987 Laurea magistrale in Chimica, Università di Perugia (UniPG), Italia

BORSE DI STUDIO

1992/1993 Borsa di studio del Consiglio Nazionale delle Ricerche, Italia
Laboratorio di Biofisica Molecolare, Università di Oxford

1999/2000 Borsa di studio del Consiglio Nazionale delle Ricerche, Italia
Laboratorio di Chimica Farmaceutica, Università di Losanna

CARRIERA ACCADEMICA

1989/2000 Ricercatore, UniPG

2000/2005 Assistente, UniPG

2005/presente Professore Ordinario, UniPG

RUOLI ATTUALI

Professore ordinario di Chimica Organica, UniPG

Direttore scientifico del consorzio farmaceutico dal titolo "Human Cytochrome Consortium Initiative"

Direttore scientifico di Molecular Discovery Ltd, UK

Direttore scientifico di Molecular Horizon, IT

PREMI

2001 Hansch Award dalla QSAR and Modeling Society, Tilton (USA)

2005 Research Award dalla Divisione di Chimica Organica della Società di Chimica Italiana

2009 Novartis Lecturship Award dalla azienda farmaceutica Novartis, Basilea

2014 Gold medal Award Angelo Mangini dalla Società di Chimica Italiana

2015 Gold medal Herman Wold Award dalla Società di Chimica Svedese

2019 Diploma onorario della International Scientific Partnership Foundation Russa

Madrelingua Italiano

Inglese	COMPRESIONE		PARLATO		PRODUZIONE SCRITTA
	Ascolto	Lettura	Interazione	Produzione orale	
	C1/C2	C1/C2	C1/C2	C1/C2	C1/C2

Livelli: A1/A2: Utente base - B1/B2: Utente intermedio - C1/C2: Utente avanzato
[Quadro Comune Europeo di Riferimento delle Lingue](#)

Interessi di ricerca *in silico*

Chemioinformatica	Sviluppo di procedure <i>in silico</i> per produrre modelli innovativi devoti alla descrizione di entità chimiche nell'ambito del drug design. Sviluppo di metodi di simulazione riguardante processi di trasferimento elettronico su proteine e metalloproteine (citocromi, enzimi contenenti molibdopterina, Monoossigenasi contenente flavina).
Metabolismo umano e farmacocinetica	Quantificazione e predizione delle proprietà ADMET (Assorbimento, Distribuzione, Metabolismo, Escrezione, Tossicità). Sviluppo di metodi ultra-fast per l'identificazione di metaboliti con metodologie LC-MSMS.
Lipidomica	Procedure avanzate di lipidomica mirata, non mirata e MALDI. Sviluppo di metodi per quantificare risultati specifici ottenuti in modelli tridimensionali di tessuti umani (microtessuti) (effetti tossici precoci e meccanismi di molecole candidate a diventare farmaci).
QSAR	3D-QSAR e QSPR per il disegno e lo sviluppo di molecole.
Tossicità di xenobiotici	Nuove metodologie <i>in silico</i> ed <i>in vitro</i> per la valutazione della sicurezza dei farmaci.
Sintesi organica	Predizione di processi di sintesi organica. Predizione della nucleofilicità ed elettrofilicità di molecole con metodi <i>ab initio</i> (sviluppati in house).

Principali argomenti di ricerca in laboratorio

MetID con LC-MSMS	Studi funzionali e meccanicistici su metalloproteine e/o proteine coinvolte nel metabolismo di Fase I e II degli xenobiotici. Sviluppo di software per la predizione della formazione dei metaboliti e della specificità delle isoforme proteiche.
Lipidomica untargeted	Identificazione automatica di lipidi da diverse matrici biologiche. Analisi statistica multivariata su lipidi. Predizione della tossicità precoce da esperimenti condotti su microtessuti di origine umana (fegato, epidermide, pancreas, cervello).
Virtual screening	Impiego dei campi di interazione molecolare per produrre fingerprint uniche di ligandi e proteine. Predizione della network di molecole di acqua nelle cavità proteiche con applicazioni in drug design.
QSPR	Sviluppo di Quantitative Structure Property Relationships per piccoli ligandi (farmaci) e/o strutture macromolecolari per la definizione del profilo ADME di ligandi e/o macromolecole.

ATTIVITÀ DI REFERAGGIO

Nazionale	Membro del Gruppo di Valutazione dei grant proposals dell'UniPG (2014).
Internazionale	Valutatore di proposals dell'UE (2000-2008). Valutatore dei progetti di ricerca del Consiglio Nazionale delle Ricerche dei Paesi Bassi (NWO). Referee per numerosi giornali internazionali e progetti dell'UE (FP6, FP7). Membro del Life Science Evaluation Panel nel Research Training Networks in Israele (2016).

ALTRE ATTIVITÀ

Membro del consiglio scientifico di Epix Pharmaceutical (TelAviv and Boston.)
 Membro del consiglio scientifico di ABAC Therapeutics (Barcelona).
 Membro dei seguenti Editorial Boards: *Journal of Computer Aided Molecular Design*, *QSAR and*

Combinatorial Sciences and Drug Discovery Today.

Fondatore della QSAR, Cheminformatics and Modeling Society (QCMS) nel 2017.

PRODUTTIVITÀ E IMPATTO SCIENTIFICI

Pubblicazioni	165
Libro	1
Capitoli di libri	45
Convegni	27
Inviti come speaker a congressi, workshops e Istituti di ricerca	220
(WoK ISI) Totale delle citazioni senza self-citations	6800
(WoK ISI) Media di citazioni per pubblicazione	44.29
(WoK ISI) H-index	43

PATENTS

- 1) Costi M.P., Costantino L., Sammak S., Ponterini G., Ferrari S., Luciani R., Franchini S., Santucci M., Cruciani G., Carosati E., New molecules as antitumor agents, 22/01/2013 n.mi2013a000085.
- 2) New phenyl group containing compound comprising e.g. methyl 2-amino-4-(1,3-benzodioxol-5-yl)-1-(3-chloro-2-methylphenyl)-5-oxo-1,4,5,6,7,8-hexahydroquinoline-3-carboxylate is a viral RNA polymerase inhibitor, useful to treat influenza, Patent Number(s): WO2013123974-A1.

INSEGNAMENTI

Chimica Organica I	Per il corso di laurea triennale in Chimica, UniPG
Molecular Design	Per il corso di laurea triennale in Chimica, UniPG
Cheminformatica	Per il corso di laurea magistrale in Scienze Chimiche, UniPG
Artificial Intelligence and Deep Learning in Chemistry	Per il Corso di Dottorato in Scienze Chimiche, UniPG

ORGANIZZAZIONE DI CONGRESSI SCIENTIFICI

16° Simposio Europeo di "QSAR & MM"; 10-17 settembre 2006, Italia.

Perugia Fluorine Days: 2° Simposio Internazionale di "Organofluorine Compounds in Biomedical and Agricultural Sciences", 11-15 luglio 2010, Perugia, Italia.

VI, VII and VIII Workshop Europei in Drug Design June 03 - 09, 2007; May 24 - 30, 2009; May 22 - 28, 2011 - Certosa di Pontignano, Siena, Italia.

Meeting dell' European Project LIGHTS (Ligand Interfering with HumanThymidylate Synthase) 22-23/10/2008, Perugia, Italia.

Meeting dell' European Project DEPICT (Designing Therapeutic Protein-Protein Inhibitors for Brain Cancer Treatments), 30/03/2009, Perugia, Italia.

Meeting per lo Human Liver Consortium Project, 30/05/2012, Perugia, Italia.

PRINCIPALI COLLABORAZIONI ATTIVE

Prof. Guido Franzoso, Imperial College, UK – predizioni attraverso analisi di lipidomica in cellule del sistema nervoso centrale.

Prof. Jean-Michel Scherrmann, University Paris Descartes, FR – identificazione *in silico* di substrati e inibitori di un nuovo sistema di antiporto protonico.

Prof. Andrea Cavalli, Istituto Italiano di Tecnologia IIT, Genova, Italy – collaborazioni su procedure di molecular dynamics per l'identificazione di target molecolari.

Prof. Paul Digard, University of Cambridge and Edimburgh, UK – disegno e sviluppo di nuove entità chimiche contro virus dell'influenza.

Prof. Manuel Pastor, IMIM, Barcelona, Spain – collaborazione sul progetto eTOX.

Prof. Thierry Langer, University of Vienna, Austria – collaborazione sul modeling di farmacofori.

Prof. Tudor Oprea, University of New Mexico, Albuquerque, USA – drug repurposing.

Prof. Ismael Zamora, LMD, Barcelona, Spain – sviluppo di un database del metabolismo umano.

Dr. Khader Awwad, AbbVie Deutschland GmbH & Co. KG, Ludwigshafen/Rhein, Germany – flux analysis in lipidomica e lipidomica untargeted.

Dr. Roy Vaz, Sanofi, Cambridge, Boston, MA – modeling di composti antitumorali per PDL1.

Dr. Philippe Vayer, Servier, Orleans, France – calcolo dei parametri ADMET per nuove entità chimiche.

Dr. Simone Sciabola, Pfizer, Cambridge, Boston, MA – predizione *in silico* di drug-endpoints attraverso analisi di lipidomica.

Dr. Rubén Alvarez-Sanchez, Roche, Basel, CH – determinazione sperimentale del pKa di nuove entità chimiche.

Dr. Kevin Bateman, Merck, Kenilworth, New Jersey, USA – predizione e identificazione automatiche di metaboliti umani.