

## ALLEGATO 3

### 1. PROCEDURA

<b>Dipartimento di Scienze Biomolecolari (DISB)</b>	
Gruppo scientifico-disciplinare	03/CHEM-07 – Chimica farmaceutica, tossicologica, nutraceutico-alimentare, delle fermentazioni e dei prodotti per il benessere e per la salute
Settore scientifico-disciplinare	CHEM-07/A – Chimica farmaceutica
Titolo del programma di ricerca	Integrazione di metodi biofisici nella progettazione di ligandi multitarget
Titolo del programma di ricerca (inglese)	Integration of biophysical methods in the design of multi-target ligands
Descrizione del programma di ricerca	Questo progetto è incentrato nell'integrazione di metodi biofisici nei protocolli usati nel disegno di ligandi multitarget (MTDL) presso l'Università degli Studi di Urbino. Obiettivo 1: Impiegare tecniche biofisiche come termoforesi su microscala (MST), risonanza magnetica nucleare (NMR), risonanza plasmonica di superficie (SPR) e dicroismo circolare (CD) per quantificare le interazioni proteinaligando in campagne di screening. I composti testati proverranno da screening virtuale supportato da IA di librerie ultra-larghe di composti commerciali, dalla proprietaria UniURB Library o da composti naturali, così da rendere efficiente l'identificazione di hit. Obiettivo 2: Eseguire un'ottimizzazione razionale degli hit, integrando: i) sintesi organica per esplorare le relazioni struttura-attività (SAR) e migliorare il profilo di druglikeness; ii) valutazione della cinetica di legame mediante SPR per quantificare il tempo di residenza; iii) docking e calcoli di energia libera per prioritizzare prioritizzando i composti target; iv) la spettrometria di massa potrebbe essere utilizzata per studiare la natura (es. covalente) delle interazioni proteina-ligando. Obiettivo 3: Promuovere ai saggi biochimici e cellulari solo i composti più promettenti, complementando il dato biofisico. Risultato atteso: Combinando biofisica, sintesi, modellistica e saggi tradizionali, questo progetto mira a fornire un hit multi-target ottimizzato pronto per progredire nel percorso traslazionale.
Descrizione del programma di ricerca (inglese)	This project focuses on the integration of biophysical techniques into the ligand design protocols for multi-target directed ligands (MTDLs) at the University of Urbino. Objective 1: Apply biophysical methods such as microscale thermophoresis (MST), nuclear magnetic

	resonance (NMR), surface plasmon resonance (SPR), and circular dichroism (CD) to quantify protein–ligand interactions during screening campaigns. Compounds will be sourced from AI-assisted virtual screening of ultra-large commercial libraries, the proprietary UniURB Library, or collections of natural products, to enable efficient hit identification. Objective 2: Perform rational hit optimization by integrating: i) organic synthesis to explore structure - activity relationships (SAR) and improve drug-likeness; ii) binding kinetics assessment via SPR to determine residence time;iii) molecular docking and free energy calculations to prioritize target compounds; iv) mass spectrometry, potentially used to investigate the nature (e.g., covalent) of protein–ligand interactions.Objective 3: Advance only the most promising compounds to biochemical and cellular assays, guided by the complementary biophysical data. Expected Outcome: By combining biophysical methods, synthesis, computational modeling, and conventional assays, this project aims to deliver an optimized multi-target hit suitable for progression along the translational drug discovery pipeline.
Numero contratti	1
Area	03 – Scienze Chimiche
Struttura di afferenza	Dipartimento di Scienze Biomolecolari (DISB)
Tutor	Prof. Giovanni BOTTEGONI
Costo totale annuo	€ 53.229,90
Importo annuo lordo percipiente	€ 37.998,83
Progetto	Avviso MUR D.D. n. 47/2025 – PNRR (Missione 4 - Componente 2 - Investimento 1.2) CUP: H33C25000210006
Numero massimo di pubblicazioni:	5
Lingua richiesta dalla procedura	Inglese e italiano
Lingua nella quale si svolgerà il colloquio	Italiano
<b>Valutazione titoli: 07/05/2025 alle ore 10:30</b>	
<b>Colloquio con i candidati: 07/05/2025 alle ore 12:30 in modalità telematica</b>	
<b>Link: <a href="https://meet.google.com/dbp-sfqh-ycs">https://meet.google.com/dbp-sfqh-ycs</a></b>	

## 2. CRITERI DI VALUTAZIONE DELLA COMMISSIONE

### A. Qualità, originalità ed innovatività della proposta progettuale, con riferimento al programma di ricerca oggetto della selezione fino ad un massimo di 25 punti

**B. Attinenza e rilevanza delle attività di ricerca precedentemente svolte, nonché delle eventuali esperienze lavorative, in relazione ai contenuti del programma di ricerca oggetto della selezione fino ad un massimo di 25 punti**

- a) Assegno di ricerca su tematiche pertinenti (ogni anno) pt\_5
- b) Borsa di studio su tematiche pertinenti (ogni borsa) pt\_3
- c) Attività documentata di ricerca con contratto presso enti pubblici o privati (ogni contratto) pt\_2
- d) Tirocinio in lab di ricerca presso enti pubblici o privati (ogni tirocinio) pt\_1

**C. Attinenza delle pubblicazioni allegate con il programma di ricerca oggetto della selezione fino ad un massimo di 30 punti**

- a) Pubblicazioni su riviste di rilievo internazionale su tematiche pertinenti (ogni pubblicazione) pt\_5
- b) Pubblicazioni su riviste di rilievo nazionale su tematiche pertinenti (ogni pubblicazione) pt\_2
- c) Comunicazioni orali presentate direttamente dal candidato a seminari o convegni pertinenti (ogni comunicazione) pt\_1
- d) Poster presentati direttamente dal candidato a seminari o convegni pertinenti (ogni poster) pt\_0,5

**D. Colloquio volto ad accertare l'idoneità allo svolgimento dell'attività di ricerca oggetto del contratto e alla realizzazione della proposta progettuale presentata nonché alla valutazione della conoscenza della lingua inglese e/o di altre lingue rilevanti per la ricerca fino ad un massimo di 20 punti**