Bando di selezione pubblica per titoli e colloquio per il conferimento di un assegno di ricerca – lettera b) di durata annuale.

Allegato A

○ **Titolo del progetto/Tema di ricerca in italiano:**

Applicazione di tecniche computazionali per identificare e sviluppare nuovi chaperoni della rodopsina a partire da fonti naturali

○ **Titolo del progetto/Tema di ricerca in inglese:**

Application of computational techniques for the identification and development of novel rhodopsin pharmacological chaperones from natural sources

○ **Settore Scientifico Disciplinare:**

CHIM/08, Chimica Farmaceutica

○ **Settore concorsuale:**

03/D1 Chimica e tecnologie farmaceutiche, tossicologiche e nutraceutico-alimentari

○ **Campo principale della ricerca:**

Chemistry

○ **Descrizione della ricerca in italiano (max 1000 caratteri):**

Il progetto è finalizzato alla identificazione di chaperoni della rodopsina sfruttando la diversità chimica dei prodotti naturali. Saranno applicati approcci di structure- e ligand-based virtual screening per trovare nuovi ligandi della rodopsina. Il fine ultimo sarà la identificazione di composti non-retinoidi capaci di legare la rodopsina mutata, tramite simulazioni di docking classico e covalente (che rappresenterà la tecnica maggiormente utilizzata). Le stesse tecniche saranno usate per la identificazione di ligandi di siti allosterici presenti sulla rodopsina. Il virtual screening verrà applicato a librerie di composti commercialmente disponibili, tipo la parte della banca dati ZINC dedicata ai composti naturali. Una volta identificati ed acquistati o sintetizzati, gli hit compounds saranno saggiati in saggi funzionali per confermare i risultati computazionali.

○ **Descrizione della ricerca in inglese (max 1000 caratteri):**

This research project will focus on the identification of rhodopsin pharmacological chaperones, by exploiting the large chemical diversity of natural products. Structure- and ligand-based virtual screening will be applied to discover novel rhodopsin binder candidates. The main goal is to identify non-retinoid compounds able to bind the retinal binding pocket of mutated rhodopsin, using both conventional docking and a new reactive docking protocol (as the major technique to be applied) for the identification of irreversible binders. Target potential allosteric sites using the same computational approach will be also studied. Commercially available libraries, as well as curated collections of natural compounds from ZINC (200-500k compounds), will be selected for the virtual screening. Functional assays will be utilized to confirm the computational results.

○ **Attività affidate all'assegnista di ricerca:**

Target analysis and setup of the computational protocols (classical and covalent docking).

Identification of natural products libraries to be used for virtual screening.

Structure-based virtual screening.

Functional assays.

○ **Sede dell'attività di ricerca:**

Dipartimento di Biotecnologie Chimica e Farmacia

○ **Eventuale numero massimo di pubblicazioni da allegare alla domanda dell'assegnista: 3**

Responsabile scientifico dell'assegno di ricerca:

Siena, data della firma digitale

Il Segretario Amministrativo

Il Direttore del Dipartimento