

# Proposte di tesi – CdS Farmacia 20/05/2026

---

Dipartimento di Scienze della Vita - Università di Modena e Reggio Emilia



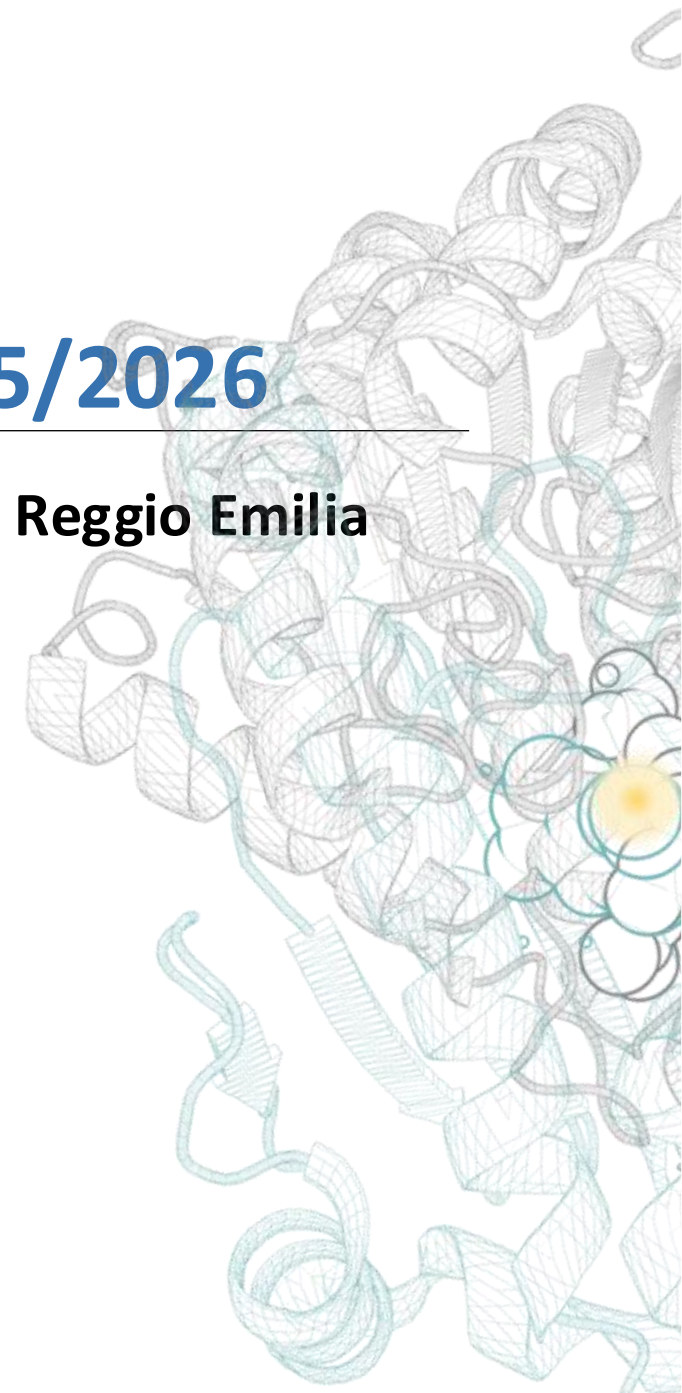
[www.mmddlab.unimore.it](http://www.mmddlab.unimore.it)

**MOLECULAR MODELLING  
&  
DRUG DESIGN LAB**

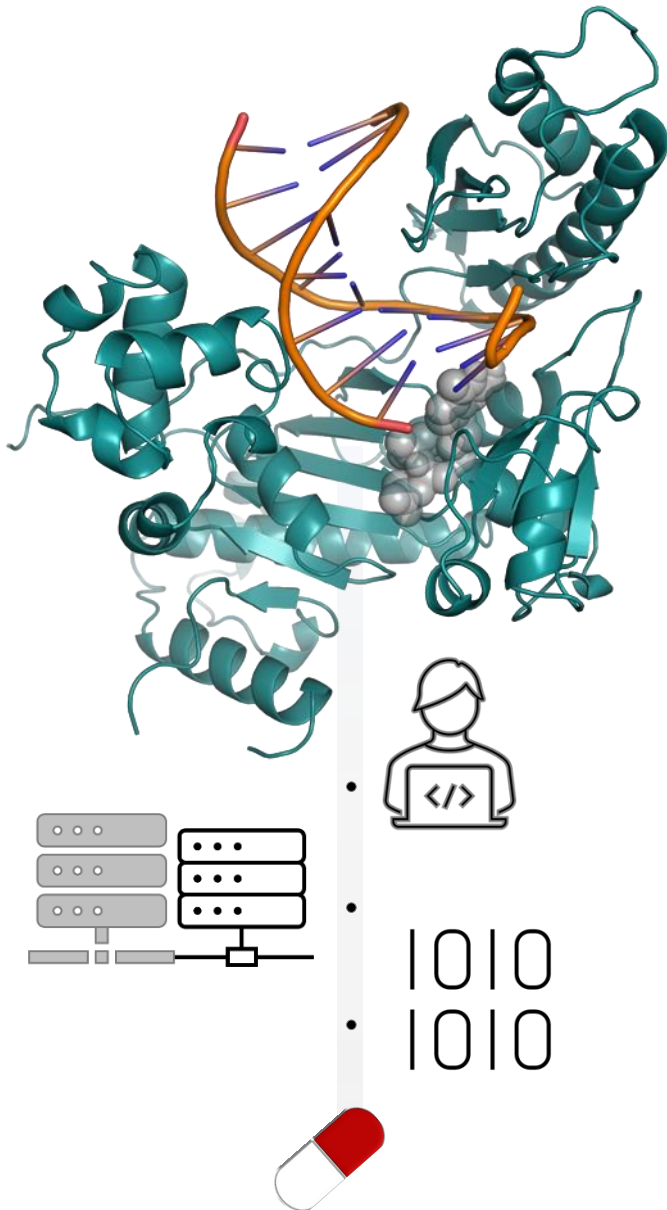
**Prof. Giulio Rastelli**

Dr. Luca Pinzi

Dr. Federica Borghi

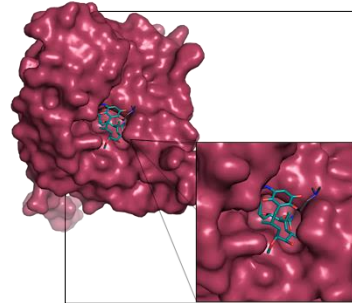


# Molecular Modelling & Drug Design Lab

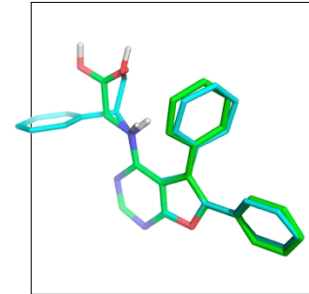


## APPROCCI

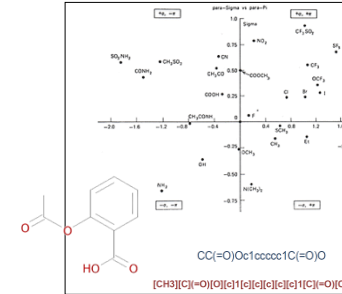
Structure-Based



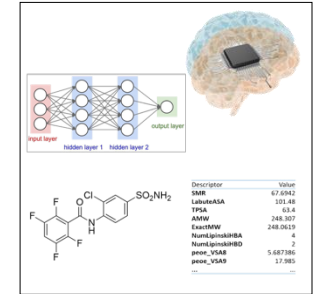
Ligand-Based



Cheminformatici

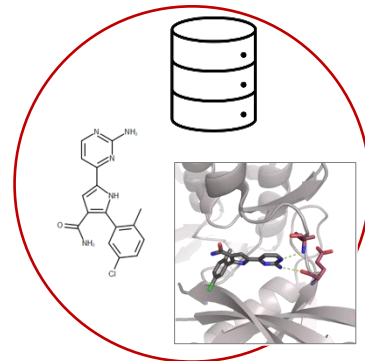


Machine Learning (AI)

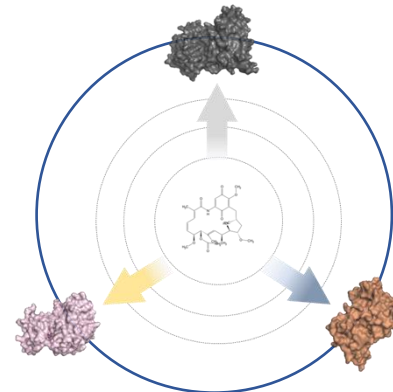


## OBIETTIVI

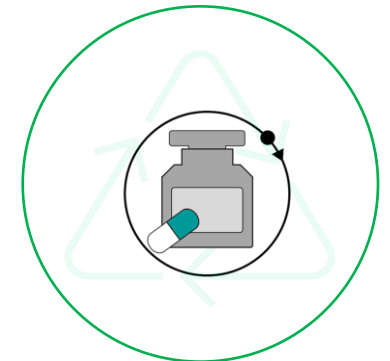
Progettazione e sviluppo di molecole ad attività di interesse terapeutico

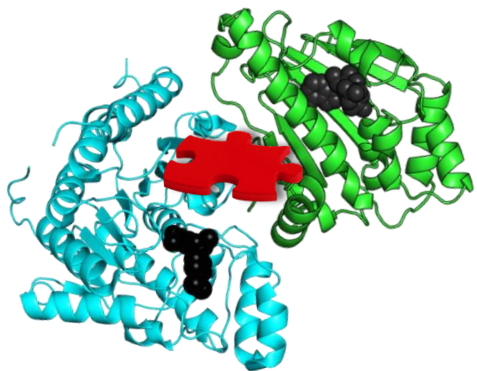


Target identification and profiling

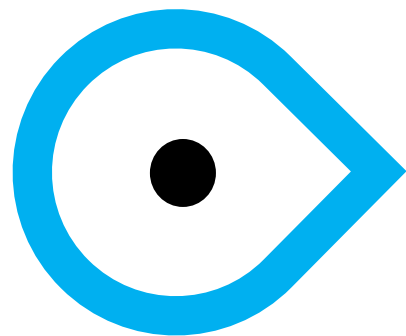


Riposizionamento di molecole verso nuovi utilizzi terapeutici

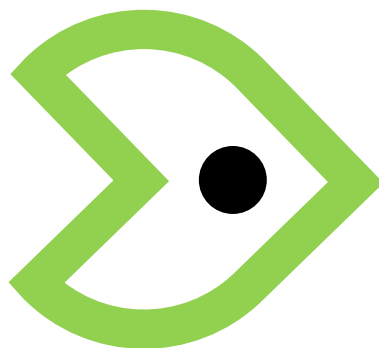




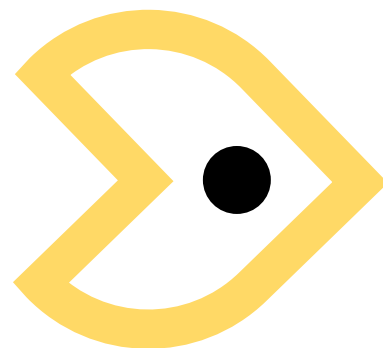
**1) Targeting del carcinoma prostatico resistente alla castrazione mediante inibitori duali delle proteine HDAC6 e Hsp90.**



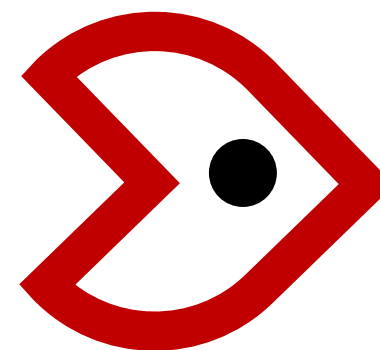
**Progettazione  
molecolare**



**Sintesi  
chimica**



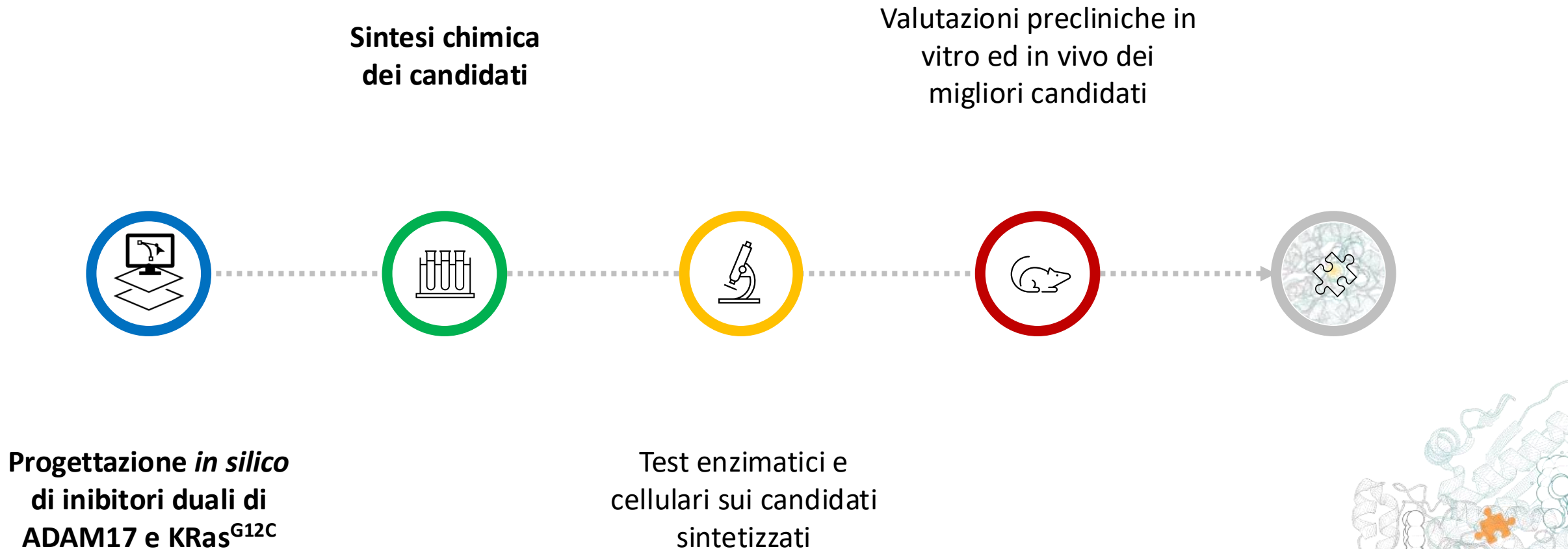
**Biologia e  
Farmacologia**



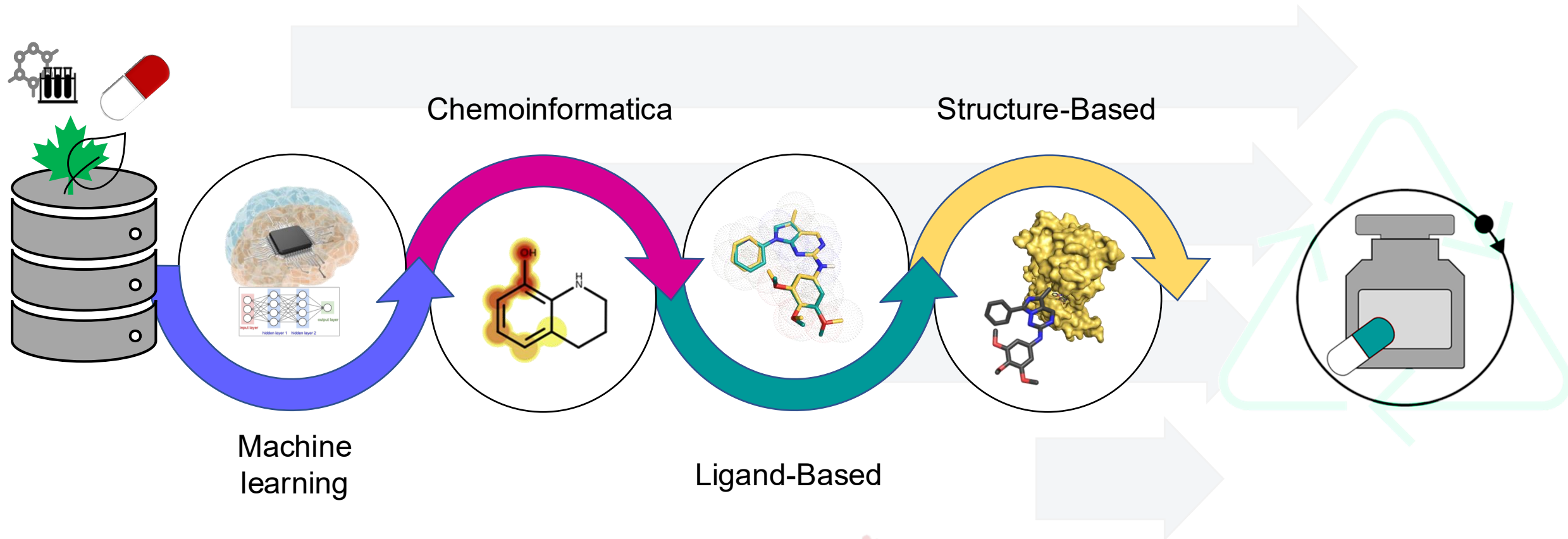
**Cristallografia**



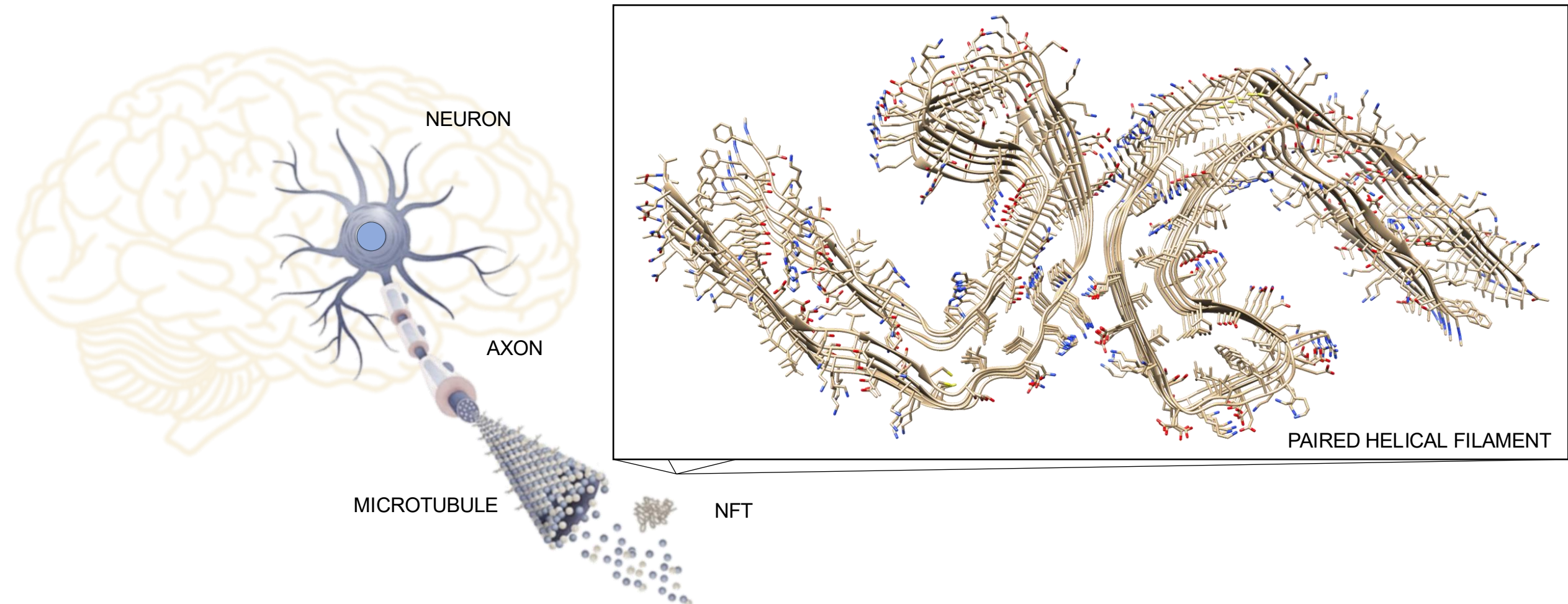
## 2) Progettazione e sviluppo di inibitori duali di KRas<sup>G12C</sup>/ADAM17 per il trattamento del carcinoma polmonare non a piccole cellule resistente.



## 3) Riposizionamento terapeutico di farmaci mediante l'uso di metodi computazionali.



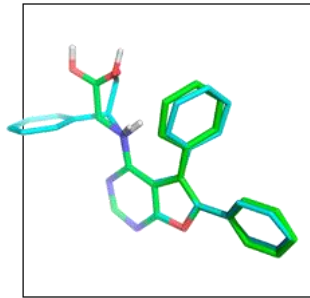
## 4) Progettazione degli inibitori dell'aggregazione di TAU al fine di ripristinare l'interazione TAU-microtubuli nei neuroni, per il trattamento della malattia di Alzheimer.



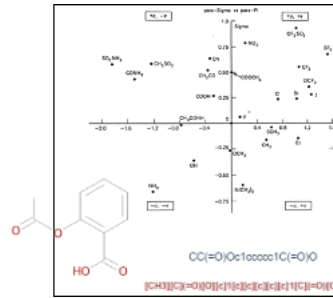
# Progetti di ricerca

## 5) Sviluppo di una piattaforma digitale innovativa per la progettazione di farmaci.

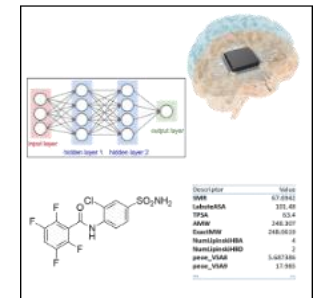
Approcci  
Ligand-Based



Approcci  
chemoinformatici



Machine  
Learning (AI)



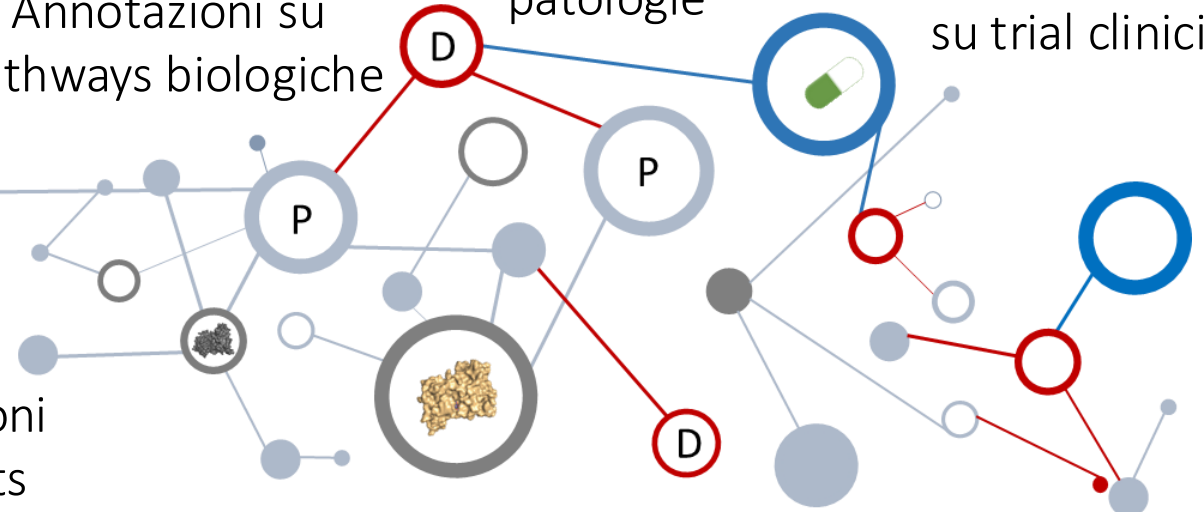
Annotazioni  
su molecole

Annotazioni  
su Targets

Annotazioni su  
pathways biologiche

Annotazioni su  
patologie

Annotazioni  
su trial clinici



# OPPORTUNITÀ DI TESI

## N. 3 OPPORTUNITÀ DI TESI SPERIMENTALI SU PROGETTI:

- 1) Targeting del carcinoma prostatico resistente alla castrazione mediante inibitori duali delle proteine HDAC6 e Hsp90.
- 2) Progettazione e sviluppo di inibitori duali di KRas<sup>G12C</sup>/ADAM17 per il trattamento del carcinoma polmonare non a piccole cellule resistente.
- 3) Riposizionamento terapeutico di farmaci mediante l'uso di metodi computazionali.
- 4) Progettazione degli inibitori dell'aggregazione di TAU al fine di ripristinare l'interazione TAU-microtubuli nei neuroni, per il trattamento della malattia di Alzheimer.
- 5) Sviluppo di una piattaforma digitale innovativa per la progettazione di farmaci.

## N. 1 OPPORTUNITÀ DI TESI COMPILATIVA SU:

Temi relativi al targeting di specifiche patologie complesse come le malattie neurodegenerative ed il cancro mediante inibitori multi-target e/o al riposizionamento terapeutico dei farmaci mediante l'uso di metodi computazionali, da concordare con il/la laureando/a.

## OPPORTUNITÀ DI TESI IN ERASMUS:

### Università di Osnabrück (Germania)

Tesi sperimentale in ambito biologico relativa al progetto «Progettazione degli inibitori dell'aggregazione di TAU al fine di ripristinare l'interazione TAU-microtubuli nei neuroni, per il trattamento della malattia di Alzheimer.»

