

Proposte di tesi – CdS CTF 25/05/2026

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



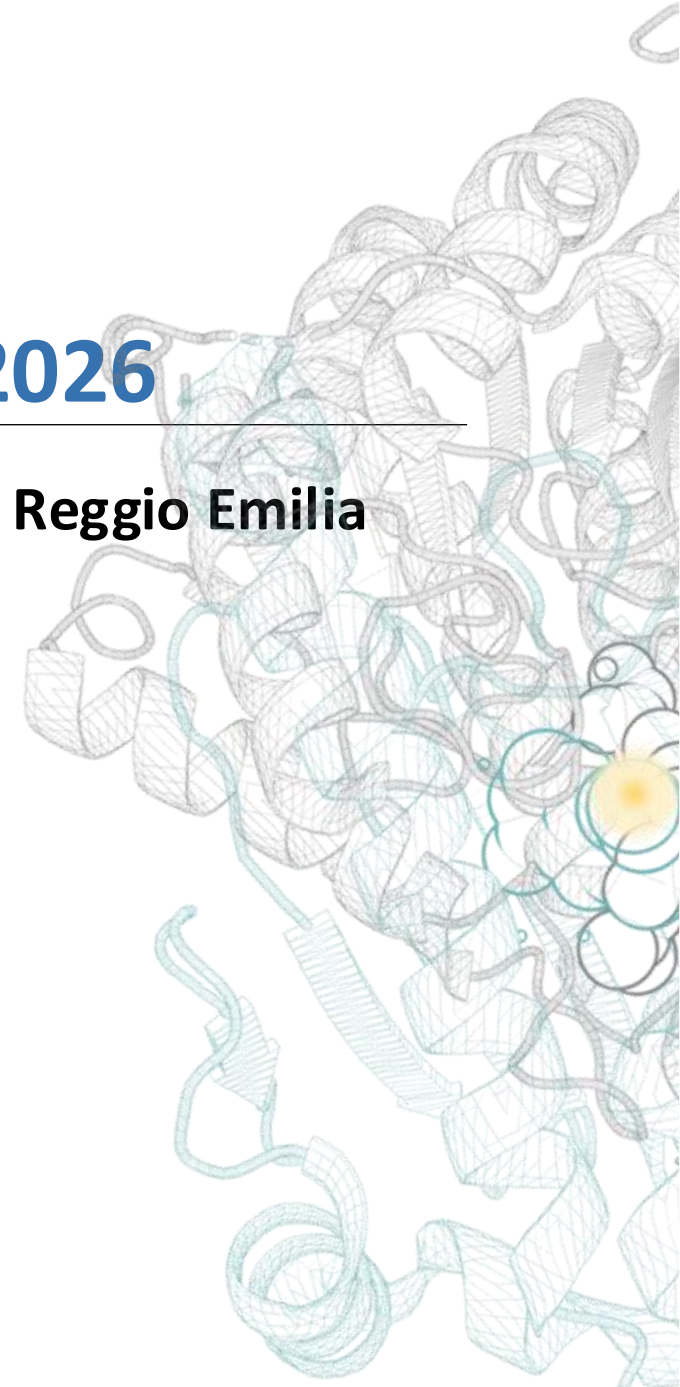
www.mmddlab.unimore.it

**MOLECULAR MODELLING
&
DRUG DESIGN LAB**

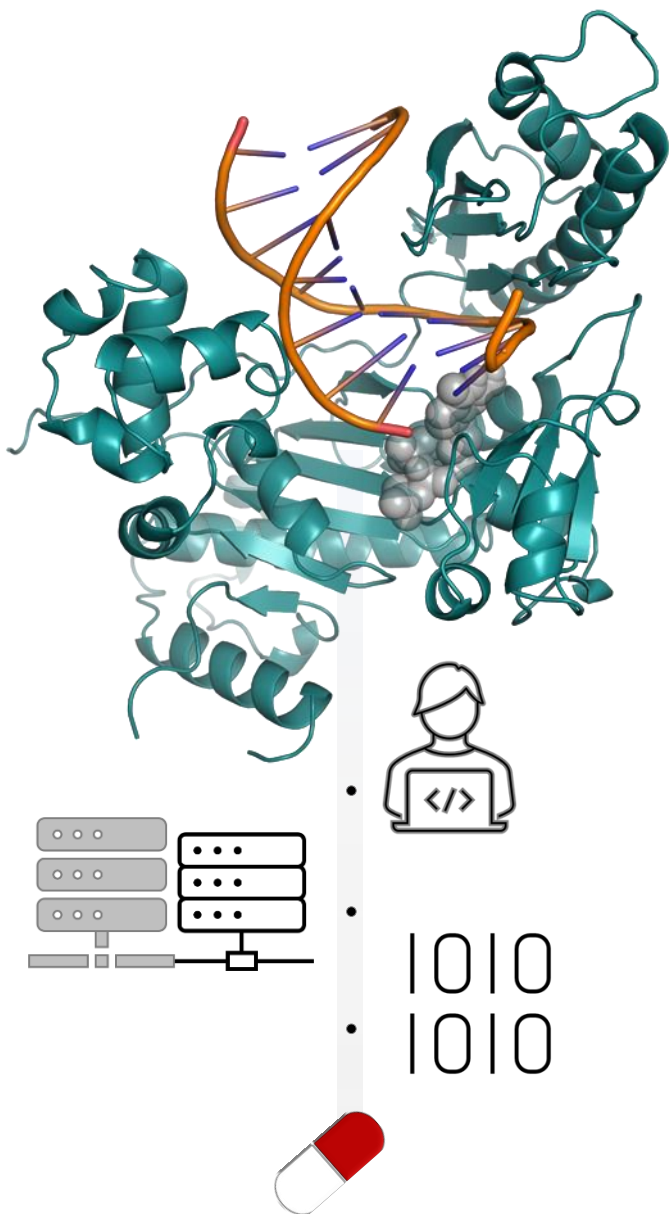
Prof. Giulio Rastelli

Dr. Luca Pinzi

Dr. Federica Borghi

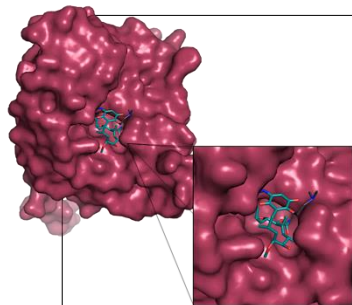


Molecular Modelling & Drug Design Lab

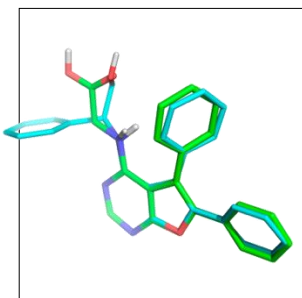


APPROCCI

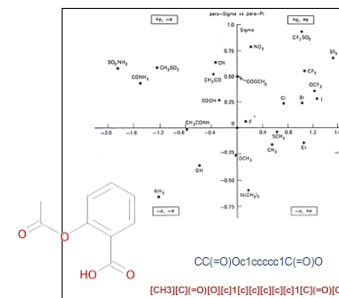
Structure-Based



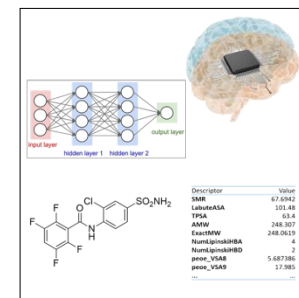
Ligand-Based



Cheminformatici

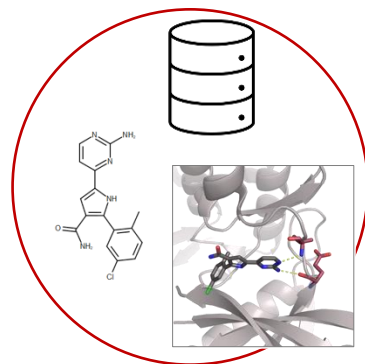


Machine Learning (AI)

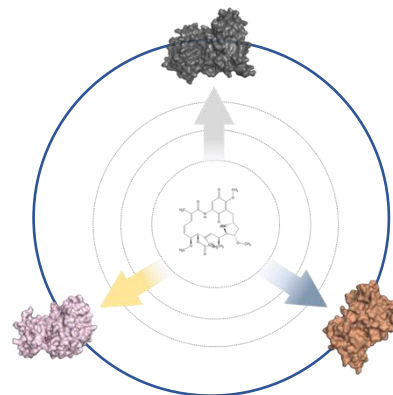


OBIETTIVI

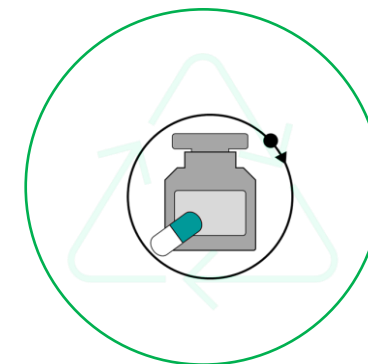
Progettazione e sviluppo di molecole ad attività di interesse terapeutico

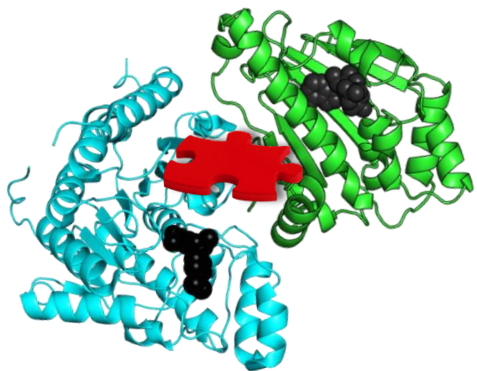


Target identification and profiling

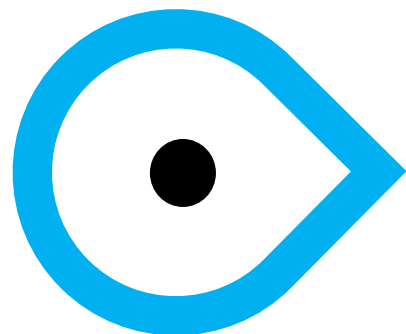


Riposizionamento di molecole verso nuovi utilizzi terapeutici

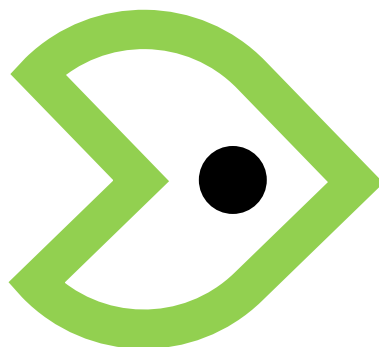




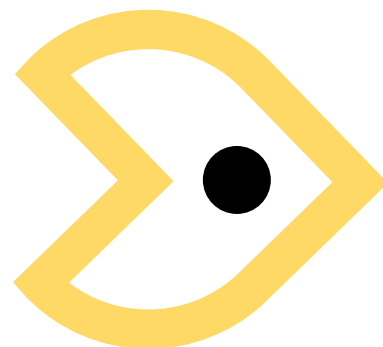
1) Targeting del carcinoma prostatico resistente alla castrazione mediante inibitori duali delle proteine HDAC6 e Hsp90.



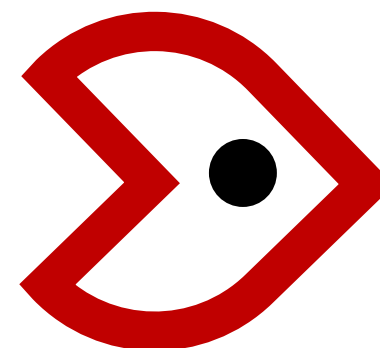
**Progettazione
molecolare**



**Sintesi
chimica**



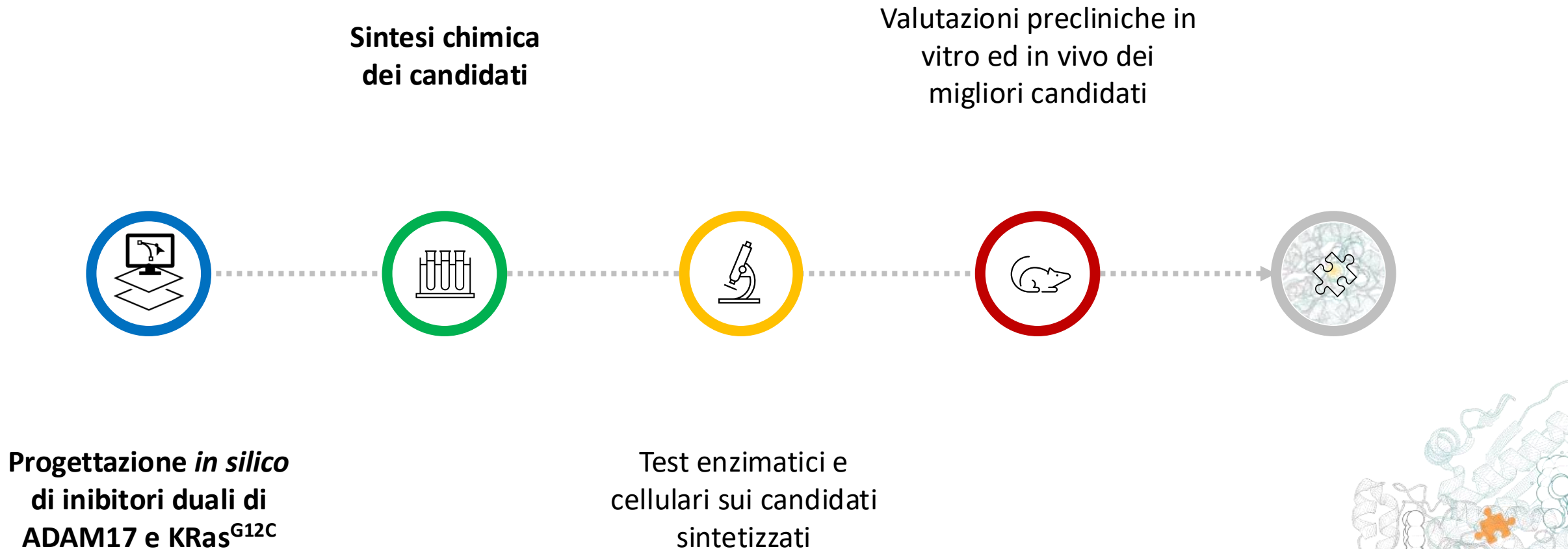
**Biologia e
Farmacologia**



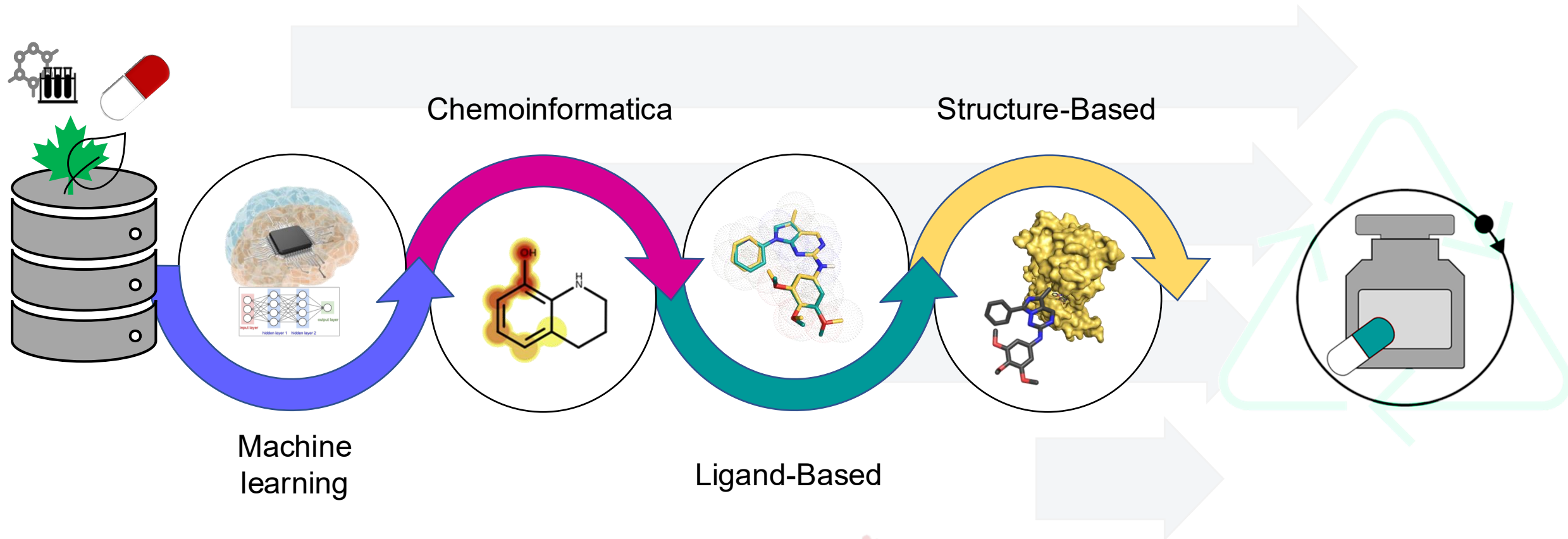
Cristallografia



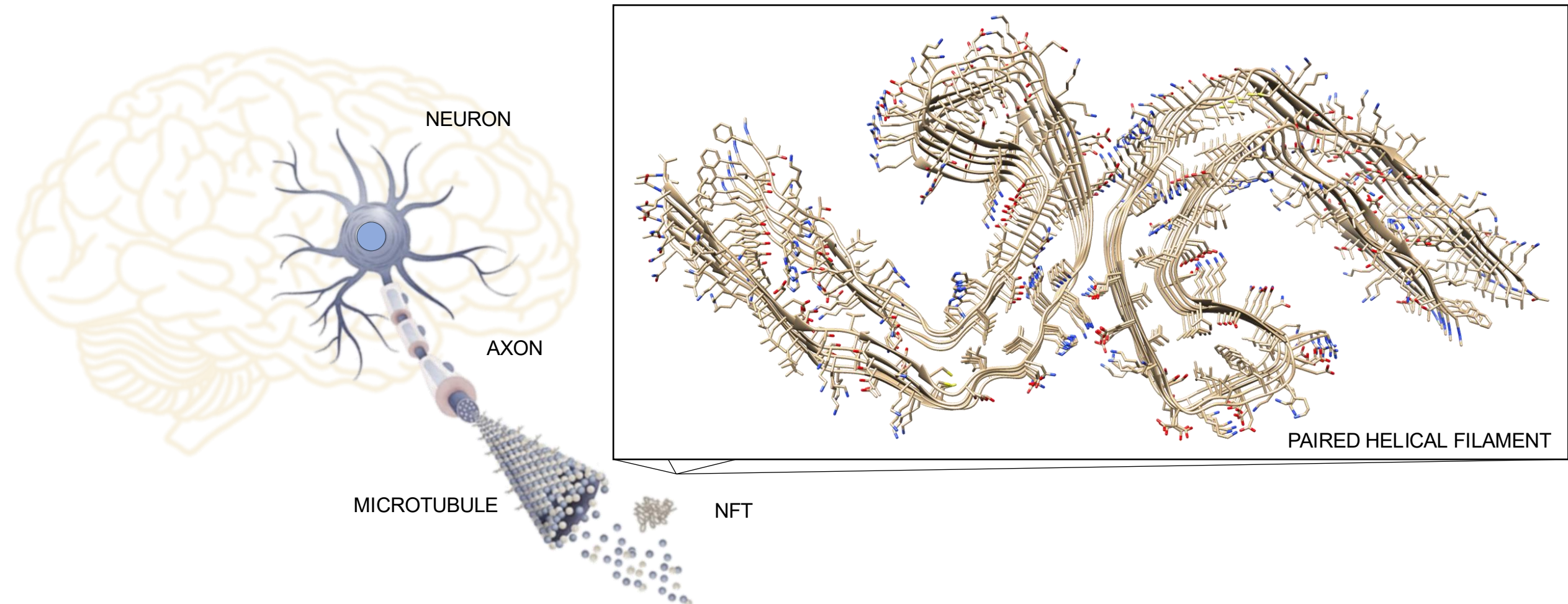
2) Progettazione e sviluppo di inibitori duali di KRas^{G12C}/ADAM17 per il trattamento del carcinoma polmonare non a piccole cellule resistente.



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



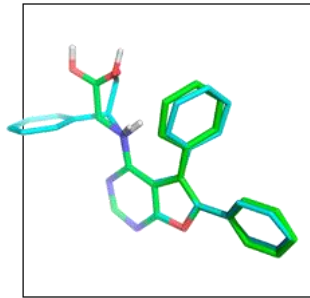
4) Progettazione degli inibitori dell'aggregazione di TAU al fine di ripristinare l'interazione TAU-microtubuli nei neuroni, per il trattamento della malattia di Alzheimer.



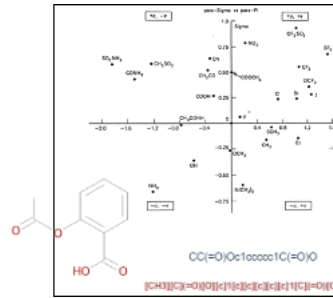
Progetti di ricerca

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

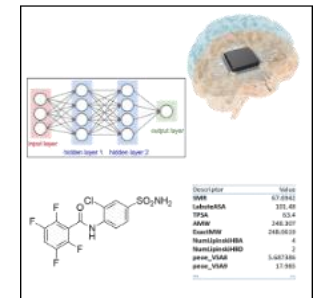
Approcci
Ligand-Based



Approcci
chemoinformatici



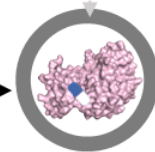
Machine
Learning (AI)



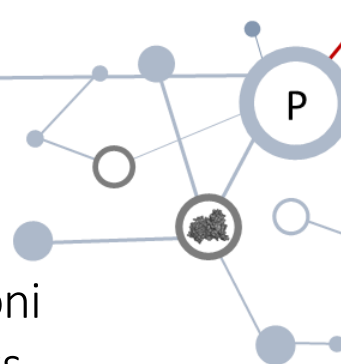
Annotazioni
su molecole



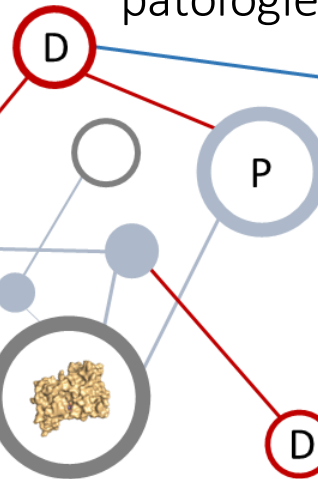
Annotazioni
su Targets



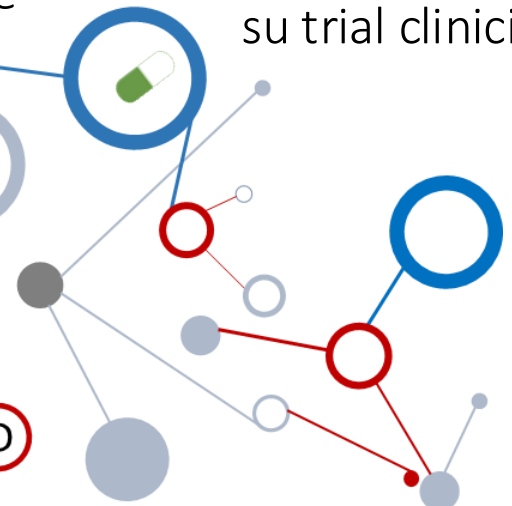
Annotazioni su
pathways biologiche



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^{G12C}/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.»

