UNIVERSITÀ
DI SIENA
1240

Oggetto: n. 1 Borsa di ricerca

1. ***Titolo (argomento) della ricerca***: Studi meccanicistici e progettazione di inibitori per metalloenzimi ed enzimi redox umani e parassitari

2. ***Obiettivo del progetto della ricerca:*** i principali obbiettivi del progetto di ricerca sono:
   a) utilizzare dati cristallografici precedentemente ottenuti attraverso una campagna di fragment screening sul metallo-enzima umani hCAII per progettare inibitori innovativi attraverso approcci di fragment-linking e fragment-merging.
   b) Sviluppare un meccanismo di reazione per il metallo-enzima umano HuHf ed dell'enzima redox parassitario *Tb*PTR1 sulla base di evidenze strutturali già ottenute dal gruppo di ricerca mediante l'applicazione di approcci *in silico* di docking e dinamica molecolare.

3. ***L'attività del borsista riguarderà***: utilizzo di dati cristallografici relativi a metallo-enzimi umani ed enzimi parassitari coinvolti in processi redox per *a*) progettazione di nuovi inibitori attraverso processi di fragment-linking e fragment-merging; *b*) definizione di meccanismi di reazione combinando dati strutturali e approcci *in silico* di docking e dinamica molecolare.

4. ***Responsabile scientifico (tutor):*** Prof.ssa Cecilia Pozzi

5. ***Struttura presso cui svolgerà l'attività*** : Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia.

6. ***Durata della borsa***: sei mesi

7. ***Importo della borsa***: euro 6600 lordo beneficiario

8. ***Titoli richiesti***: LM-54- LM-13

9. ***Modalità di selezione***: Curriculum e titoli (la Commissione – se ritenuto opportuno – potrà decidere in sede di valutazione di titoli e curriculum se effettuare il colloquio.