



**SARDIGNA CHIRCAS  
SARDEGNA RICERCHE**



REGIONE AUTÒNOMA DE SARDIGNA  
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



**Porto Conte  
Ricerche**

## PROGRAMMA

Scientific School: “NMR in Drug Discovery”

Parco Scientifico e Tecnologico della Sardegna Pula (Cagliari)

22-24 settembre 2025

### 22 SETTEMBRE

#### Giorno 1 – Introduzione sulla spettroscopia NMR in drug discovery

**8:45 – 10 Registrazione**

**10.00 Introduzione al Corso**

**h 10:15- 11:45** Principi generali della spettroscopia di Risonanza Magnetica Nucleare (momento angolare di spin, momento magnetico, magnetizzazione macroscopica, livelli energetici); parametri NMR (chemical shift, larghezza di riga, area del segnale, accoppiamento scalare).

**Daniel Oscar Cicero** (Università Tor Vergata Roma)

**11:45 Coffe Break**

**12:15-13:00** – Il rilassamento nucleare; l'effetto Overhauser nucleare (NOE). - La spettroscopia NMR multidimensionale

**Daniel Oscar Cicero** (Università Tor Vergata Roma)

**13:00 14:00 Light lunch**

**14:00 - 15:30** - Caratterizzazione NMR di piccole molecole: esperimenti 1D e 2D necessari e strategie per l'assegnazione e interpretazione degli spettri.

**Alfonso Mangoni** Università degli Studi di Napoli “Federico II”

**15:30 - Coffe Break**

**16:00-17:00** Uso della spettroscopia NMR per lo studio di piccole molecole in soluzione: esempi pratici

**Alfonso Mangoni** Università degli Studi di Napoli “Federico II”

**17:00-17:30** Discussione

**h. 19:00 APERITIVO SOCIALE**

### 23 SETTEMBRE

#### Giorno 2 – Ligand-observed binding experiments

**9:15- 11:00** Principi della spettroscopia NMR per la caratterizzazione delle interazioni molecolari e introduzione allo studio delle interazioni proteina-ligando mediante esperimenti NMR ligand-observed: Transferred NOE (TrNOE); Saturation Transfer Difference (STD-NMR), (WaterLOGSY), coefficienti di diffusione, teoria ed esempi



**SARDIGNA CHIRCAS  
SARDEGNA RICERCHE**



**REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA  
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA**



Cristina Airoidi Università degli studi Milano Bicocca

**11:00- 11:30 Coffe Break**

**11:30-12:30** Esperimenti ligand-based in condizioni “non-convenzionali”: screening di miscele complesse; on-cell STD NMR.

Cristina Airoidi Università degli studi Milano Bicocca

**12:30 13:30 Light lunch**

**13:30-15:30** – Settaggio degli esperimenti NMR per la caratterizzazione di piccole molecole\_

Francesca Benevelli (BRUKER)

**15:30 – 16:00 Coffe Break**

**16:00-17:00** Acquisizione esperimenti basati sulle metodologie Ligand observed.

Francesca Benevelli (BRUKER)

**17:00-17:30 Discussione**

**24 SETTEMBRE**

**Giorno 3 – Protein-observed binding: struttura tridimensionale delle proteine**

**h 9:15- 11:00** Applicazioni NMR per lo studio delle interazioni proteina-ligando mediante esperimenti protein-observed

Luigi Russo, Università degli studi della Campania “Luigi Vanvitelli”

**11:00- 11:30 Coffe Break**

**11:30-13:00** Metodologie NMR per lo studio di proteine ad alto peso

**Angelo Gallo** Università degli studi di Torino

**13:00 14:00 Lunch/pranzo**

**14:00- 15:30 -** Applicazioni  $^{19}\text{F}$  NMR per lo studio delle interazioni molecolari: (es. interazione con metalli, interazione proteina-proteina, equilibri conformazionali) **Luigi Russo**, Università degli studi della Campania “Luigi Vanvitelli”

**15:30 – 16:00 Coffe Break**

**16:00-17:00** Approcci integrati basati sull’utilizzo di metodi computazionali (es. AlphaFold) e parametri NMR (RDCs, chemical Shifts, NOEs) **Gianluca D’Abrosca** Link Campus University, Roma - Università degli Studi della Campania “Luigi Vanvitelli”

**17:00 – 17:30** Sessione di confronto e domande aperte con i docenti

Conclusione della scuola