



ALMA MATER STUDIORUM
UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

DIPARTIMENTO
DI FARMACIA
E BIOTECNOLOGIE

Progettazione e sintesi di agenti fototeranostici sostenibili diretti alla proteasi NS2B-NS3 del virus West Nile.

Piano delle attività e criteri di valutazione

1) Piano delle attività

- Progetto di ricerca correlato all'incarico di ricerca:

“PRECISE-WNV Applicazione della Tecnologia Fototeranostica per Avanzare le Terapie di Medicina di Precisione per l'Infezione da Virus del Nilo Occidentale”,

- Progetto di ricerca correlato all'incarico di ricerca in inglese:

Applying Phototheranostic Technology to Advance Precision Medicine Therapies for West Nile Virus Infection - PRECISE-WNV.

- Descrizione delle attività di assistenza alla ricerca che saranno affidate al titolare dell'incarico:

Il/la titolare dell'incarico sarà coinvolto/a nelle attività di chimica farmaceutica del progetto PRECISE-WNV, con particolare riferimento alla progettazione, sintesi, purificazione e caratterizzazione strutturale di nuovi agenti fototeranostici sostenibili basati su piccole molecole e diretti contro la proteasi NS2B-NS3 del virus West Nile. Le attività comprenderanno, ove applicabile, l'adozione di principi e strategie di chimica sostenibile nella progettazione e sintesi dei composti, nonché la caratterizzazione fotofisica dei composti ottenuti, la valutazione della loro permeabilità alla barriera emato-encefalica e la selezione dei candidati più promettenti per le successive valutazioni biologiche e di imaging cellulare.

- Descrizione delle attività di assistenza alla ricerca che saranno affidate al titolare dell'incarico in inglese:

The research fellow will be involved in the medicinal chemistry activities of the PRECISE-WNV project, with particular focus on the design, synthesis, purification, and structural characterization of novel sustainable small-molecule phototheranostic agents targeting the West Nile virus NS2B-NS3 protease. Activities will include, where applicable, the implementation of sustainable chemistry principles and strategies in compound design and synthesis, as well as the photophysical characterization of the resulting compounds, assessment of their blood-brain barrier permeability, and selection of the most promising candidates for subsequent biological evaluation and cellular imaging studies.

- Piano delle attività:

L'attività di ricerca sarà focalizzata sulla progettazione, sintesi e ottimizzazione di una libreria mirata di agenti fototeranostici sostenibili basati su piccole molecole e diretti contro la proteasi NS2B-NS3 del virus West Nile, secondo un approccio di chimica farmaceutica. La progettazione comprenderà l'esplorazione di differenti architetture molecolari e linker, inclusi linker PEG, alifatici e rigidi, per la coniugazione della componente di targeting virale con un fluoroforo NIR-II e l'ottimizzazione delle proprietà dei composti. Nella progettazione e sintesi saranno inoltre considerate, ove applicabili, strategie volte a migliorare la sostenibilità dei processi sintetici e a ridurre l'impatto ambientale. I composti ottenuti saranno sintetizzati, purificati e caratterizzati strutturalmente mediante spettroscopia ^1H -NMR e ^{13}C -NMR e ne sarà verificata la purezza. Seguirà la caratterizzazione



ALMA MATER STUDIORUM
UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

DIPARTIMENTO
DI FARMACIA
E BIOTECNOLOGIE

fotofisica mediante tecniche spettroscopiche, con valutazione delle proprietà di assorbimento ed emissione, della resa quantica e della fotostabilità. I composti selezionati saranno quindi valutati per la capacità di attraversare la barriera emato-encefalica mediante saggio PAMPA. L'analisi integrata dei dati chimici, fotofisici e di permeabilità guiderà la selezione e la prioritizzazione dei candidati più promettenti per le successive valutazioni biologiche e per studi di live-cell imaging e fluorescence profiling.

- Piano delle attività in inglese:

The research activity will focus on the design, synthesis, and optimization of a targeted library of sustainable small-molecule phototheranostic agents targeting the West Nile virus NS2B-NS3 protease, following a pharmaceutical and medicinal chemistry approach. Molecular design will include the exploration of different molecular architectures and linkers, including PEG, aliphatic, and rigid linkers, to conjugate the viral targeting moiety with the NIR-II fluorophore and optimize compound properties. Where applicable, strategies aimed at improving the sustainability of synthetic processes and reducing their environmental impact will also be considered during compound design and synthesis. The resulting compounds will be synthesized, purified, and structurally characterized by ¹H-NMR and ¹³C-NMR spectroscopy, and their purity will be assessed. This will be followed by photophysical characterization using spectroscopic techniques, including evaluation of absorption and emission properties, quantum yield, and photostability. Selected compounds will then be assessed for their ability to cross the blood-brain barrier using the PAMPA assay. Integrated analysis of chemical, photophysical, and permeability data will guide the selection and prioritization of the most promising candidates for subsequent biological evaluation and live-cell imaging and fluorescence profiling studies.

- Quantificazione figurativa delle attività annue, ai fini della rendicontazione dei costi sui progetti di ricerca:
 - 1720 ore annue

2) Criteri di valutazione, definiti sulla base di quanto stabilito all'art. 10 del Regolamento

a) coerenza del titolo di studio per l'accesso alla selezione con il progetto oggetto del bando (<i>consistency of additional qualifications with the project covered by the call for applications</i>)	<i>Coerenza del percorso formativo e delle competenze acquisite nell'ambito del titolo di studio richiesto per l'accesso con le tematiche del progetto, con particolare riferimento alla chimica farmaceutica e medicinale, alla chimica organica e alla progettazione, sintesi e caratterizzazione di molecole bioattive: fino a un massimo di 35 punti.</i> <i>Consistency of the educational background and skills acquired within the degree required for admission with the research topics of the project, with particular reference to pharmaceutical and medicinal chemistry, organic chemistry, and the design, synthesis,</i>
---	--



ALMA MATER STUDIORUM
UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

DIPARTIMENTO
DI FARMACIA
E BIOTECNOLOGIE

	<i>and characterization of bioactive molecules: up to a maximum of 35 points.</i>
b) coerenza di ulteriori titoli di studio con il progetto oggetto del bando (<i>consistency of additional qualifications with the project covered by the call for applications</i>)	<i>Coerenza di ulteriori titoli di studio e di formazione post-laurea con le tematiche del progetto, con particolare riferimento alla chimica farmaceutica e medicinale, alla progettazione e sintesi di molecole bioattive, alla chimica sostenibile e alla ricerca in ambito anti-infettivo: fino a un massimo di 20 punti.</i> <i>Consistency of additional academic qualifications and postgraduate training with the research topics of the project, with particular reference to pharmaceutical and medicinal chemistry, the design and synthesis of bioactive molecules, sustainable chemistry, and research in the anti-infective field: up to a maximum of 20 points.</i>
c) le pubblicazioni presentate in termini di originalità, innovatività, rigore metodologico, rilevanza e congruenza con il progetto oggetto del bando. La Commissione prende in considerazione esclusivamente pubblicazioni o testi accettati per la pubblicazione secondo le norme vigenti, nonché saggi inseriti in opere collettanee ed articoli editi su riviste in formato cartaceo o digitale con l'esclusione di note interne o rapporti dipartimentali (<i>the publications submitted in terms of originality, innovativeness, methodological rigour, relevance and congruence with the project covered by the call for applications. The Committee will only take into consideration publications or texts accepted for publication in accordance with the applicable regulations, as well as any essays included in collective works and articles published in journals in paper or digital format with the exclusion of internal notes or departmental reports</i>)	<i>Qualità della produzione scientifica, valutata sulla base dell'originalità, del carattere innovativo e del rigore metodologico delle pubblicazioni presentate, nonché della loro rilevanza e congruenza con le tematiche del progetto, con particolare riferimento alla chimica farmaceutica e medicinale, alla progettazione e sintesi di molecole bioattive, alla chimica sostenibile e alla ricerca in ambito anti-infettivo: fino a un massimo di 20 punti.</i> <i>Quality of the scientific production, assessed on the basis of the originality, innovative character, and methodological rigor of the submitted publications, as well as their relevance and consistency with the research topics of the project, with particular reference to pharmaceutical and medicinal chemistry, the design and synthesis of bioactive molecules, sustainable chemistry, and research in the anti-infective field: up to a maximum of 20 points.</i>
d) altri titoli collegati ad attività precedentemente svolte (es: borse di studio, partecipazione in qualità di relatore a convegni e congressi, conseguimento di premi	<i>Rilevanza e congruenza con le tematiche del progetto degli altri titoli e delle attività precedentemente svolte e debitamente attestate, quali attività di ricerca, borse di</i>



ALMA MATER STUDIORUM
UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

DIPARTIMENTO
DI FARMACIA
E BIOTECNOLOGIE

e riconoscimenti per attività di ricerca, tirocini e stage formativi, ecc.) debitamente attestati (*other qualifications related to previous activities (e.g. scholarships, participation as a speaker at conferences and congresses, receipt of prizes and awards for research activity, internships and training periods, etc.) duly certified*)

studio e di ricerca, partecipazione a progetti di ricerca, periodi di ricerca e formazione presso istituzioni nazionali o internazionali, tirocini e stage formativi, partecipazione in qualità di relatore a convegni e congressi, nonché premi e riconoscimenti per attività scientifica. Saranno in particolare valorizzate le esperienze maturate nell'ambito della chimica farmaceutica e medicinale, della progettazione e sintesi di molecole bioattive e/o sistemi molecolari bifunzionali, della chimica sostenibile e della ricerca in ambito anti-infettivo, incluse esperienze di ricerca nel campo delle infezioni virali: fino a un massimo di 25 punti.

Relevance and consistency with the research topics of the project of other duly certified qualifications and previous activities, including research activities, scholarships and research fellowships, participation in research projects, research and training periods at national or international institutions, internships and training activities, participation as a speaker at conferences and congresses, as well as prizes and awards for scientific activity. Particular consideration will be given to experience in pharmaceutical and medicinal chemistry, the design and synthesis of bioactive molecules and/or bifunctional molecular systems, sustainable chemistry, and research in the anti-infective field, including research experience in the field of viral infections: up to a maximum of 25 points.