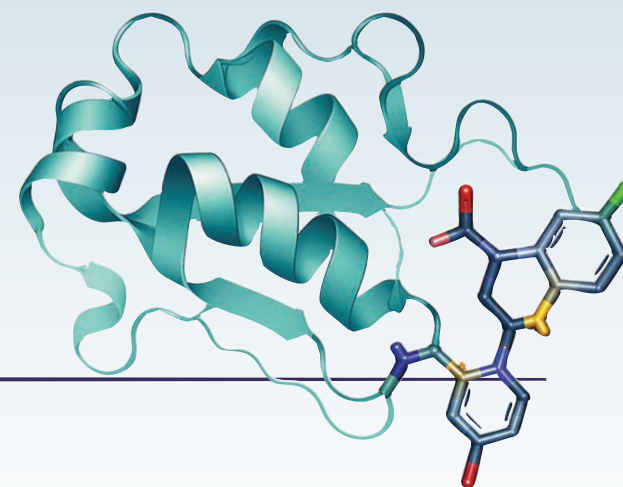
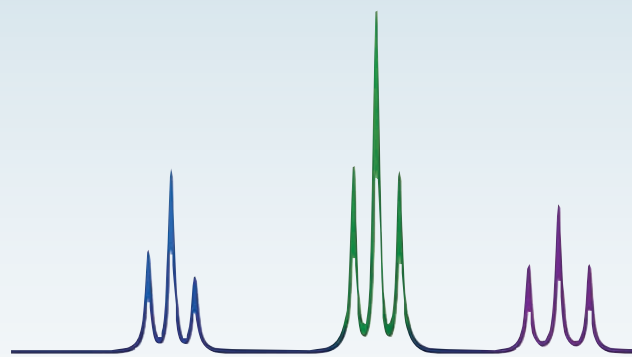
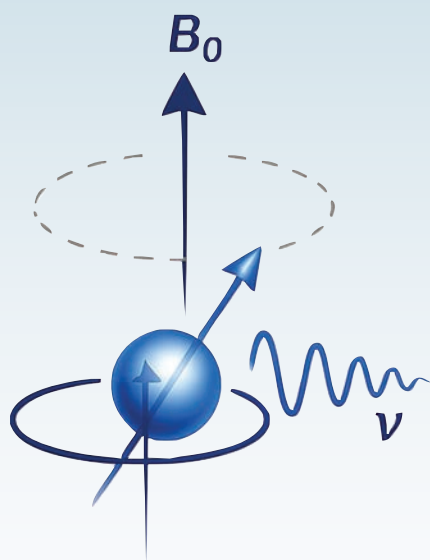




SCIENTIFIC SCHOOL: NMR IN DRUG DISCOVERY

II EDIZIONE - FROM STRUCTURE TO FUNCTION

29 settembre 2 ottobre 2026

SARDEGNA RICERCHE - Parco Scientifico e Tecnologico della Sardegna - Edificio 2 - Pula (Cagliari)

29 SETTEMBRE - GIORNO 1 - INTRODUZIONE SULLA SPETTROSCOPIA NMR IN DRUG DISCOVERY

- 08:45-09:15 Registrazione
09:15 Introduzione al Corso
9:30-11:00 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
11:00-11:30 Coffee Break
11:30-13:30 Il rilassamento nucleare; l'effetto Overhauser nucleare (NOE). La spettroscopia NMR multidimensionale.
Daniel Oscar Cicero, Università Tor Vergata Roma
13:30-14:30 Light lunch

Training Session I

- 14:30-16:00 Ottimizzazione dei parametri di acquisizione e processing degli esperimenti monodimensionali e bidimensionali. I moderni software per il processing e l'analisi degli spettri NMR: esercitazione pratica.
Valeria Vanoli, ABCS-Nanalysis
16:00-16:30 Coffee Break
16:30-17:30 Introduzione ai comandi per l'acquisizione e il processamento di spettri NMR
17:30-18:00 Discussione
19:00 Aperitivo sociale

30 SETTEMBRE - GIORNO 2 - NMR DI PICCOLE MOLECOLE

- 9:00-11:00 Esperimenti NMR per lo studio di piccole molecole in soluzione.
Alfonso Mangoni, Università degli Studi di Napoli "Federico II"
11:00-11:30 Coffee Break
11:30-13:00 Applicazioni NMR per la caratterizzazione strutturale di piccole molecole in soluzione: esempi pratici.
Alfonso Mangoni, Università degli Studi di Napoli "Federico II"
13:00-14:00 Light lunch

Training session II

- 14:00-16:00 Settaggio degli esperimenti 1D/2D NMR per la caratterizzazione di piccole molecole. Francesca Benevelli, Bruker
16:00-16:30 Coffee Break
16:30-17:30 Diffusion measurements by NMR. Marshall Smith, JEOL
17:30-18:00 Discussione

1 OTTOBRE - GIORNO 3 - PROTEIN AND LIGAND-OBSERVED NMR TECHNIQUES IN DRUG DISCOVERY

- 9:00-11:00 Principi della spettroscopia NMR per la caratterizzazione delle interazioni molecolari.
Cristina Airoidi, Università degli Studi Milano Bicocca
11:00-11:30 Coffee Break
11:30-13:30 Studio delle interazioni proteina-ligando mediante esperimenti NMR ligand-observed; WaterLOGSY, T1rho e Transferred NOE (TrNOE); Saturation Transfer Difference (STD-NMR).
Cristina Airoidi, Università degli Studi Milano Bicocca
13:30-14:30 Light lunch
14:30-16:00 Applicazioni NMR per lo studio delle interazioni proteina-ligando mediante esperimenti protein-observed.
Luigi Russo, Università degli Studi della Campania "Luigi Vanvitelli" Caserta
16:00-16:30 Coffee Break

Training session III

- 16:30-17:30 Automated Analysis of NMR Fragment Screening Data.
Nader Amin, JEOL
17:30-18:00 Discussione

2 OTTOBRE - GIORNO 4 - CARATTERIZZAZIONE DELLA STRUTTURA PROTEICA: METODI CONVENZIONALI E IBRIDI

- 9:00-11:00 Metodologie NMR per la caratterizzazione strutturale di proteine (es. strategie di assegnazione; calcolo strutturale).
Angelo Gallo, Università degli Studi di Torino
11:00-11:30 Coffee Break
11:30-13:30 Approcci integrati basati sull'utilizzo di metodi computazionali (es. AlphaFold) e parametri NMR (RDCs, chemical Shifts, NOEs).
Gianluca D'Abrosca, Link Campus University
13:30-14:30 Light lunch

Training session IV

- 14:30-16:30 Analisi e assegnazione di spettri NMR di proteine: esercitazione pratica.
Luigi Russo, Università degli Studi della Campania "Luigi Vanvitelli", Angelo Gallo Università degli Studi di Torino, Gianluca D'Abrosca Link Campus University
16:30 Conclusione della scuola

COMITATO ORGANIZZATORE

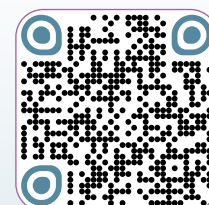
- Roberto Anedda (Porto Conte Ricerche)
- Francesca Caboi (Sardegna Ricerche)
- Luigi Russo (GIRD/ Università degli Studi della Campania "Luigi Vanvitelli" Caserta)

CON IL PATROCINIO DI



INFO E ISCRIZIONI

Kassiopea
srl



www.nmrindrugdiscovery.it