



# UNIVERSITÀ DI PISA

---

## ADVANCED COMPUTER-AIDED DRUG DESIGN

**TIZIANO TUCCINARDI**

Anno accademico 2020/21  
CdS CHIMICA E TECNOLOGIA  
FARMACEUTICHE  
Codice 340CC  
CFU 6

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
ADVANCED COMPUTER-AIDED DRUG DESIGN	CHIM/08	LEZIONI	58	TIZIANO TUCCINARDI

Obiettivi di apprendimento

### *Conoscenze*

Lo studente avrà acquisito conoscenze in merito alle tecniche avanzate di Computer-aided Drug Design.

### *Modalità di verifica delle conoscenze*

La verifica delle conoscenze sarà oggetto della valutazione della tesina sperimentale che gli studenti porteranno a termine alla fine del corso.

### *Capacità*

Lo studente saprà utilizzare il software di studi computazionali

### *Modalità di verifica delle capacità*

Lo studente dovrà preparare e presentare una relazione scritta che riporti i risultati dello studio computazionale che porterà a termine.

### *Comportamenti*

Lo studente potrà acquisire e/o sviluppare capacità di problem-solving e imparare ad utilizzare applicativi scientifici informatici

### *Modalità di verifica dei comportamenti*

Durante le sessioni di laboratorio saranno valutati i risultati ottenuti dalle attività svolte

### Prerequisiti (conoscenze iniziali)

Chimica computazionale di base

### Indicazioni metodologiche

- modo in cui si svolgono le lezioni: lezioni frontali, con ausilio di slide a disposizione degli studenti
- modo in cui si svolgono le esercitazioni in aula/laboratorio: esercitazioni singole utilizzando i PC dell'aula informatica
- tipo di strumenti di supporto: sito web (moodle)
- tipo di uso del sito di elearning del corso: scaricamento materiali didattici, comunicazioni docente-studenti, formazione di gruppi di lavoro
- tipo di interazione tra studente e docente: uso di ricevimenti, uso della posta elettronica, telefono, skype
- uso parziale o totale di lingue diverse dall'italiano: uso della lingua inglese

### Programma (contenuti dell'insegnamento)

#### **AIM**

The course aims at providing the students with understanding of computational modeling in the area of drug discovery. After finishing the course the students will have:

- Advanced understanding of ligand-protein interactions.



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

- Be familiar with a range of ligand and structure based computational methods.
- Performed computational modeling tasks using state of the art software.

### DESCRIPTION

Although no single drug has been designed solely by computer techniques, the contribution of these methods to drug discovery is no longer a matter of dispute. All the world's major pharmaceutical and biotechnology companies use computational design tools. Computer-aided drug design represents computational methods and resources that are used to facilitate the design and discovery of new therapeutic solutions. Digital repositories, containing detailed information on drugs and other useful compounds, are goldmines for the study of chemical reactions capabilities. Design libraries, with the potential to generate molecular variants in their entirety, allow the selection and sampling of chemical compounds with diverse characteristics. Fold recognition, for studying sequence-structure homology between protein sequences and structures, are helpful for inferring binding sites and molecular functions. Virtual screening, the in-silico analog of high-throughput screening, offers great promise for systematic evaluation of huge chemical libraries to identify potential lead candidates that can be synthesized and tested. In this course the bases of the computer-aided drug design will be explored, and the lectures will be accompanied by laboratory exercises.

### COURSE OUTLINE

- a) Molecular dynamic simulations;
- b) Pharmacophore-based drug design;
- c) QSAR, 3D-QSAR and in silico ADME studies
- d) Artificial intelligence methods applied to the drug discovery field.

### Bibliografia e materiale didattico

Non viene consigliato alcun testo, ma il materiale necessario verrà reso disponibile durante lo svolgimento del modulo

### Modalità d'esame

Valutazione di una Tesina

### Altri riferimenti web

[www.mmvsl.it](http://www.mmvsl.it)

*Ultimo aggiornamento 03/01/2021 12:27*