



# UNIVERSITÀ DI PISA

---

## METODI COMPUTAZIONALI IN CHIMICA FARMACEUTICA

### GABRIELLA MARIA PIA ORTORE

Anno accademico	2021/22
CdS	FARMACIA
Codice	370CC
CFU	3

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
METODI COMPUTAZIONALI IN CHIMICA FARMACEUTICA	CHIM/08	LEZIONI	21	GABRIELLA MARIA PIA ORTORE

#### Obiettivi di apprendimento

##### *Conoscenze*

Il corso si propone di fornire le conoscenze di base sui metodi computazionali comunemente utilizzati per effettuare simulazioni e previsioni di fenomeni correlati alla sfera farmaceutica.

Gli studenti apprenderanno e utilizzeranno la meccanica e dinamica molecolare per simulare le interazioni chimiche e la loro evoluzione; il docking per simulare il binding farmaco-target; i modelli farmacoforici per guidare il drug design; QSAR e QSPR per la predizione di dati incogniti.

##### *Modalità di verifica delle conoscenze*

Le conoscenze acquisite saranno verificate tramite una tesina finale

##### *Capacità*

Alla fine del corso lo studente sarà in grado di definire il tipo di studio computazionale possibile in base ai dati disponibili, e di utilizzare alcuni programmi di modellazione molecolare

##### *Modalità di verifica delle capacità*

Le capacità saranno verificate con un lavoro computazionale svolto nel laboratorio informatico

##### *Comportamenti*

Lo studente potrà sviluppare capacità di interazione con strumenti informatici mirati a studi computazionali

##### *Modalità di verifica dei comportamenti*

La familiarità con l'uso degli strumenti informatici verrà verificata e promossa dal docente seguendo le attività dei singoli studenti durante le sessioni di laboratorio

##### *Prerequisiti (conoscenze iniziali)*

Conoscenze di base sulla modalità d'interazione dei farmaci con il loro target. Conoscenze informatiche di base.

##### *Programma (contenuti dell'insegnamento)*

Ricerca ed analisi tridimensionale delle proteine: ruolo del *binding site* e dei residui nella stabilizzazione dei ligandi. Meccanica e dinamica molecolare applicate alla modellazione farmaceutica. Studi *receptor based* e *ligand based*: metodi computazionali (Docking, Homology Modeling, Cavity Detection, 3D-Qsar e Modelli Farmacoforici ) e programmi comunemente utilizzati. Cenni su Virtual Screening e predizioni ADMET.

##### *Bibliografia e materiale didattico*

Il materiale didattico sarà fornito dal docente tramite le piattaforme Moodle e Teams. Sarà richiesta l'installazione del software UCSF Chimera sul proprio PC.

##### *Modalità d'esame*



## **UNIVERSITÀ DI PISA**

---

Stesura di una tesina finale, inerente alle metodiche apprese

*Ultimo aggiornamento 04/12/2021 09:25*