



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