UNIVERSITÀ DI PISA

COMPUTER AIDED DRUG DESIGN

TIZIANO TUCCINARDI

Anno accademico	2019/20
CdS	CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE
Codice	252CC
CFU	6

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
COMPUTER AIDED DRUG DESIGN	CHIM/08	LEZIONI	66	TIZIANO TUCCINARDI

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze
Lo studente avrà acquisito conoscenze in meritoalle tecniche 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 Chimera, Maestro, Dock e Flap per l'applicazione 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)
Struttura delle proteine
Chimica farmaceutica 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 (www.mmvsl.it)
- 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 basic understanding of computational modeling in the area of drug discovery. After finishing the course the students will have:

• Basic understanding of ligand-protein interactions.
• 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) 3D visualization of biological targets (proteins and nucleic acids) and organic molecules;
b) Molecular mechanics and the conformational search;
c) Molecular dynamic simulations;
d) Pharmacophore-based drug design
e) Docking-based drug design;
f) Homology modeling techniques;
g) QSAR, 3D-QSAR and in silico ADME studies

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

Ultimo aggiornamento 21/08/2019 14:15