UNIVERSITÀ DI PISA

CHIMICA FARMACEUTICA AVANZATA PER LA RICERCA E SVILUPPO DEI FARMACI

FILIPPO MINUTOLO

Anno accademico	2022/23
CdS	CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE
Codice	305CC
CFU	6

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
CHIMICA FARMACEUTICA AVANZATA PER LA RICERCA E SVILUPPO DEI FARMACI	CHIM/08	LEZIONI	50	FILIPPO MINUTOLO TIZIANO TUCCINARDI

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze
Lo studente acquisirà una conoscenza avanzata sui meccanismi di azione/attivazione degli agenti terapeutici, nonché sui processi che portano alla progettazione ed allo sviluppo dei farmaci ed alle principali tecniche di Computer-aided Drug Design.

Modalità di verifica delle conoscenze
L'acquisizione delle conoscenze verrà verificata mediante un esame orale, in cui allo studente verrà chiesto di risolvere problemi specifici o di illustrare dei concetti.

Capacità
Alla fine del corso lo studente sarà in grado di identificare i principali meccanismi di azione/attivazione di varie classi di agenti terapeutici e dei loro profarmaci. Inoltre avrà la capacità di proporre delle modifiche strutturali per la progettazione di farmaci potenzialmente più attivi/selettivi/sviluppabili. Infine sarà in grado di utlizzare alcuni dei più comuni software di modellazione molecolare.

Modalità di verifica delle capacità
Le capacità acquisite dallo stutente nell'associare proprietà strutturali a quelle biologiche saranno verificate mediante specifiche domande che verranno poste nel corso dell'esame orale.

Comportamenti
Lo studente imparerà ad associare correttamente le strutture chimiche con le proprietà biologiche, nonché a comprendere i possibili meccanismi chimici/biologici responsabili dell'attivazione selettiva di profarmaci, e ad applicare questi concetti nella progettazione e sviluppo di nuovi agenti terapeutici. Inoltre lo studente potrà acquisire e/o sviluppare capacità di problem-solving.

Modalità di verifica dei comportamenti
Le abilità dello studente nell'individuare soluzioni all'interpretazione dei dati e nel proporre modi di progettazione di agenti terapeutici innovativi saranno verificate durante le prove d'esame.

Prerequisiti (conoscenze iniziali)
Non ci sono propedeuticità. Tuttavia lo studente dovrà essere già provvisto di buona padronanza di Chimica Farmaceutica, Chimica Organica e Biochimica, al fine di comprendere gli argomenti di questo corso. Inoltre, la conoscenza della lingua inglese è fortemente raccomandata, in quanto una parte del materiale didattico (articoli scientifici, libri di testo) è scritta in Inglese.

Indicazioni metodologiche
La modalità di erogazione di questo corso consiste in lezioni tipo seminari con l'ausilio di diapositive proiettate e di illustrazioni sulla lavagna. Ogniqualvolta non sarà possible essere fisicamente presenti in aula, la stessa modalità di lezione sarà seguita in modalità remota.

UNIVERSITÀ DI PISA

Programma (contenuti dell'insegnamento)

Complessità molecolare, elementi farmacoforici, accessibilità sintetica.
Correlazioni fra caratteristiche chimiche e proprietà biofarmacologiche.
Progettazione di farmaci basata sui "frammenti", efficienza di ligando.
Parvenza Farmacoforica (Drug likeness), considerazioni ADMET.
Profarmaci: progettazione strutturale, gruppi rimovibili/modificabili, processi di attivazione enzimatici e non-enzimatici.
Profarmaci intelligenti, profarmaci attivati in modo bioriduttivo selettivi per l'ipossia, attivazioni selettive di profarmaci mediate da enzimi (ADEPT, MDEPT, PDEPT, ecc.) o da anticorpi (ADAPT).
Agenti terapeutici polimerici. "Soft-drugs" (o "Ante-drugs").
Visualizzazione 3D di target biologici (proteine e acidi nucleici) e molecole organiche.
Meccanica molecolare ed analisi conformazionale.
Simulazioni di dinamica molecolare.
Progettazione di farmaci basati sui farmacofori.
Progettazione di farmaci basati su calcoli di docking.

Bibliografia e materiale didattico

R. B. SILVERMAN: Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action - 2nd Edition, Elsevier - Academic Press, San Diego, CA - USA, 2004. [ISBN 0-12-643732-7]

C. G. WERMUTH: The Practice of Medicinal Chemistry - 2nd Edition, Elsevier – Academic Press, London, UK, 2003. [ISBN 0-12-744481-5]

E. H. Kerns, L. Di: Drug-like Properties: Concepts, Structure Design and Methods – Academic Press / Elsevier, Burlington MA, USA, 2008. [ISBN 978-0-1236-9520-8]

Articoli provenienti dalla recente letteratura scientifica che saranno indicati a lezione.

Modalità d'esame

L'esame consiste in una interrogazione orale individuale che verrà svolta negli appelli successivi al termine del ciclo di lezioni.
Verranno poste circa tre domande sugli argomenti svolti a lezione per la durata di circa 30-45 minuti.

Ultimo aggiornamento 29/07/2022 16:46