

CompMedChem

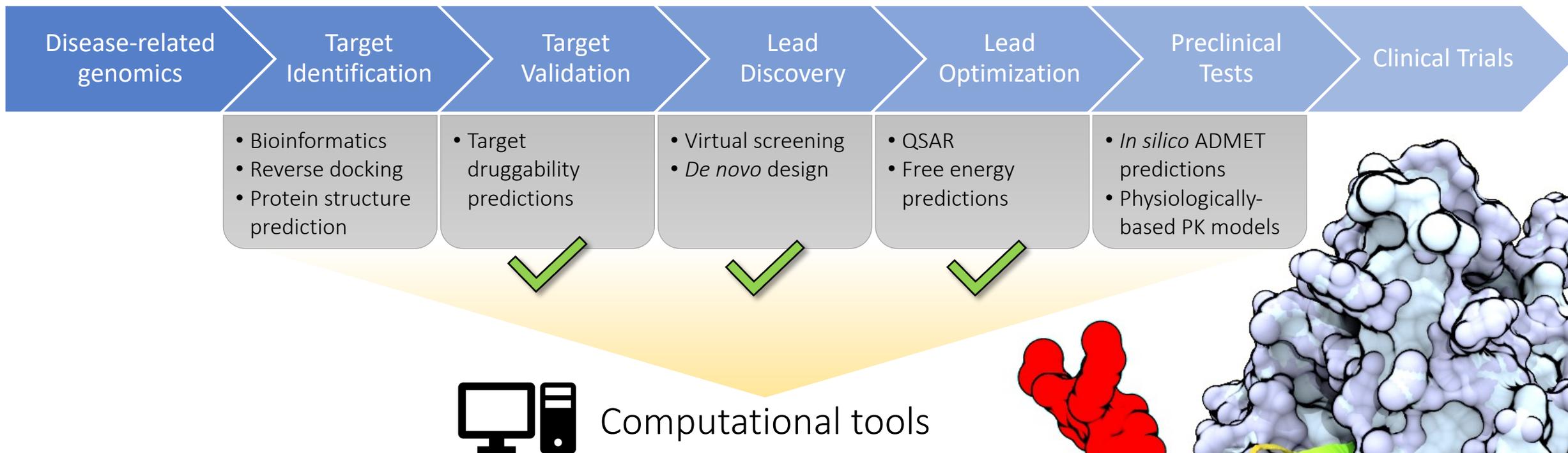
Gruppo di ricerca Masetti-Falchi-Cavalli

Matteo Masetti

Federico Falchi

CADD: Computer-Aided Drug Discovery

Drug Discovery & Development pipeline



B2845 - METODOLOGIE CHIMICO-FARMACEUTICHE PER LA SCOPERTA DI NUOVI FARMACI

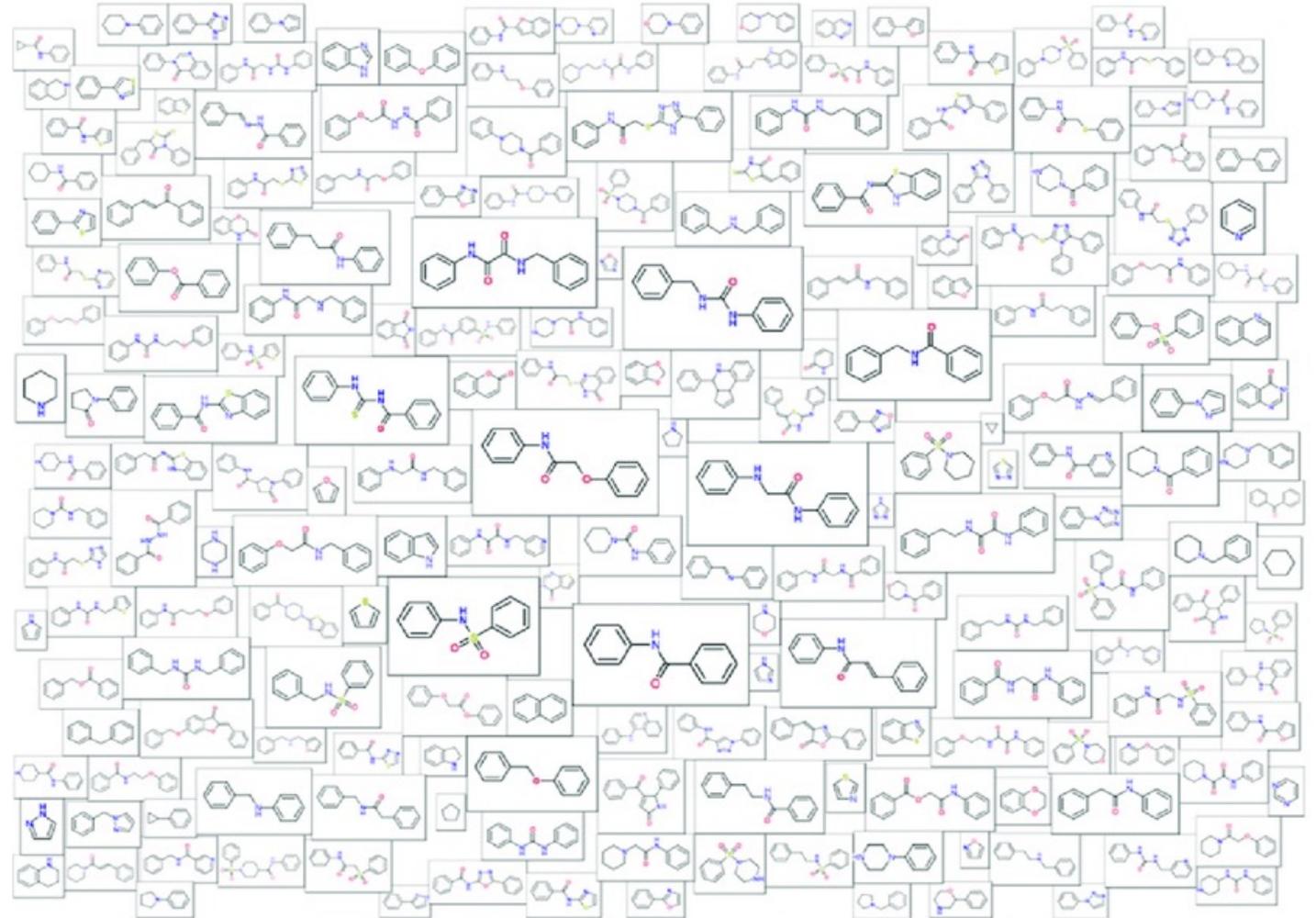
99486 - METODI SIMULATIVI E DI MACHINE LEARNING IN CHIMICA FARMACEUTICA

Studi applicativi in ambito farmaceutico (il VS)



Preparazione e filtrazione del database:

- Commerciale
- Fabit
- Privato

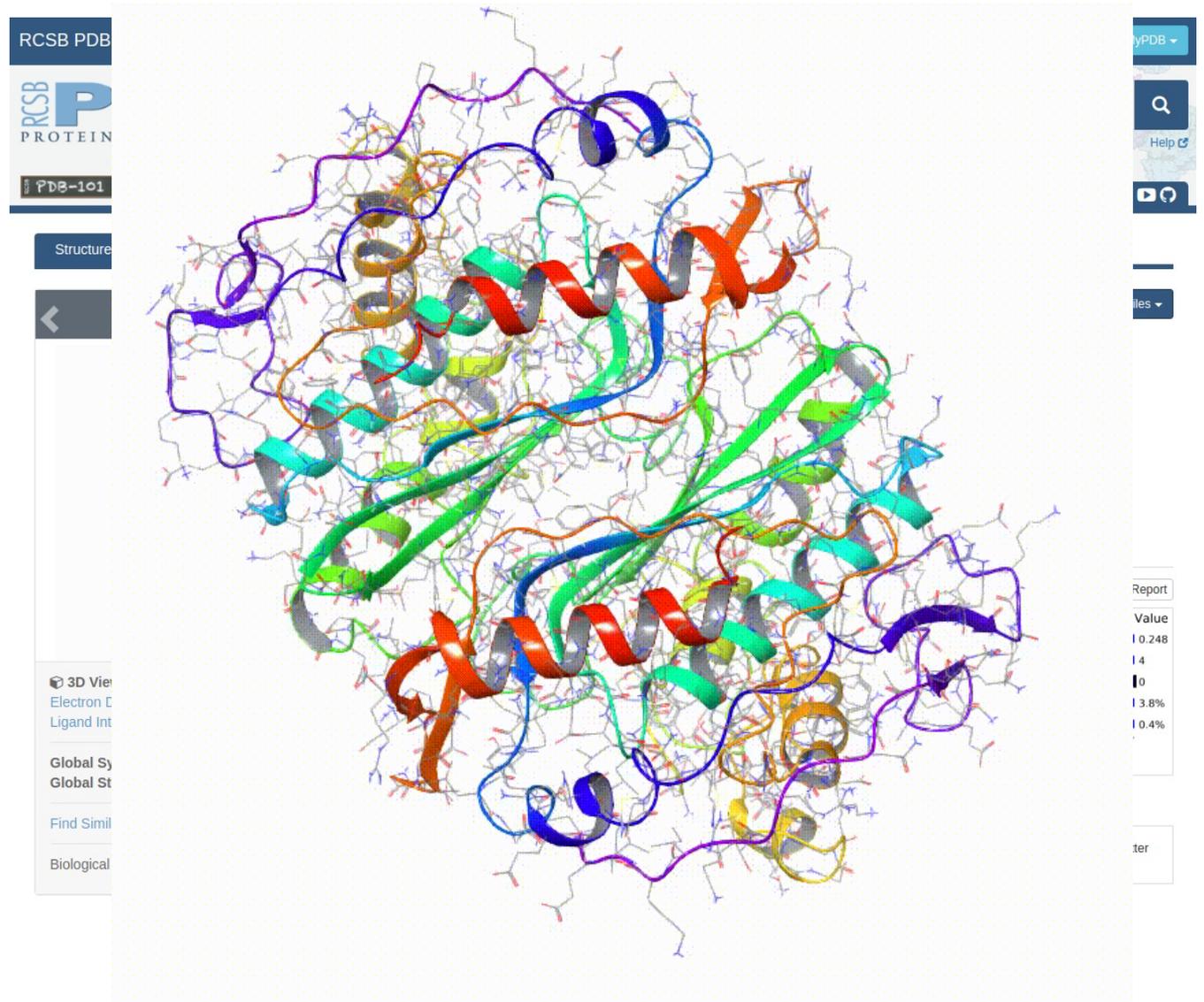


Studi applicativi in ambito farmaceutico (il VS)



Scelta ed ottimizzazione del target:

- PDB
- Costruzione della struttura della proteina o parti di essa se non disponibili (homology modelling)
- Ottimizzazione della struttura (stati di protonazione, minimizzazione, dinamica molecolare etc)



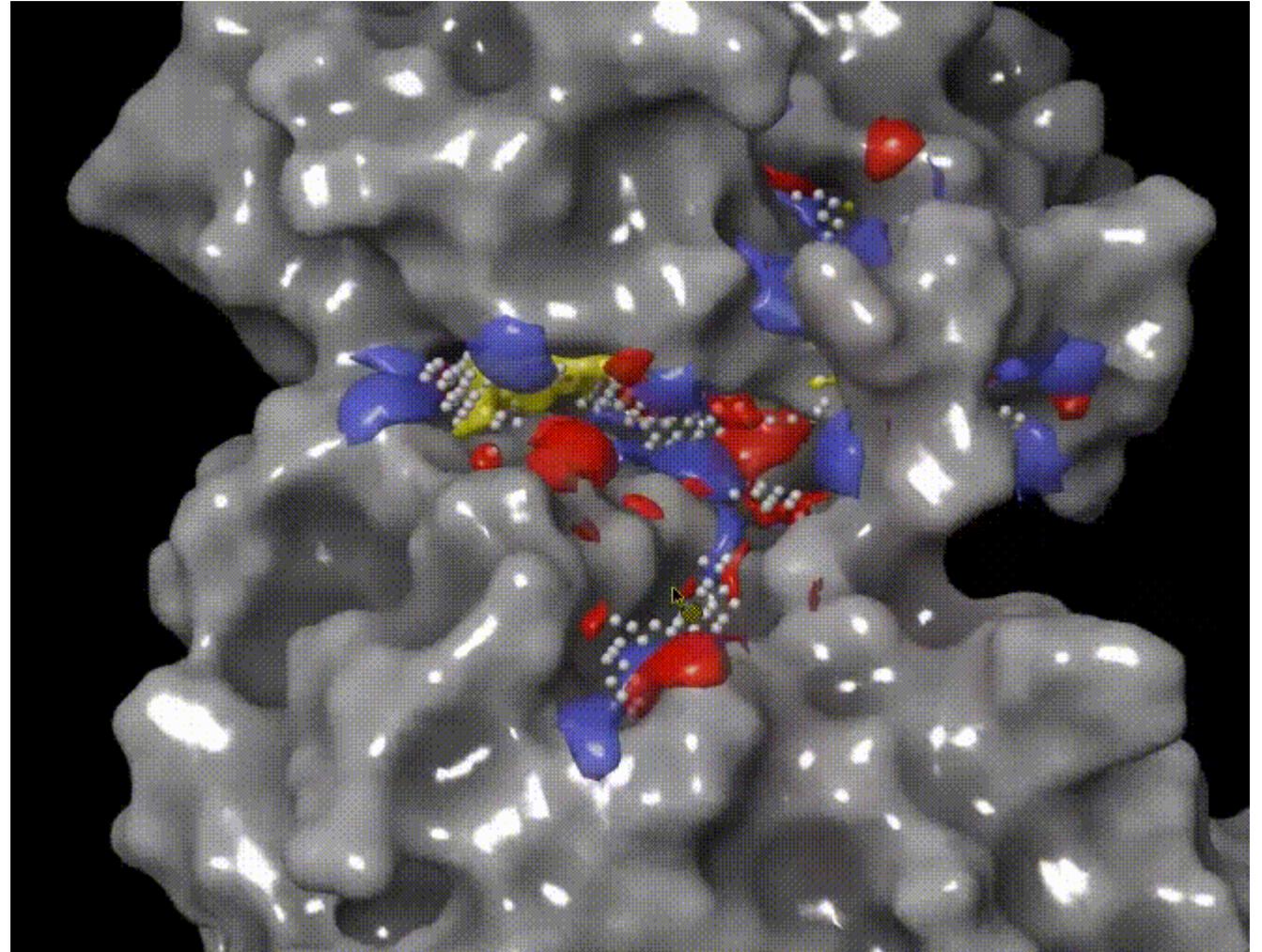
Studi applicativi in ambito farmaceutico (il VS)



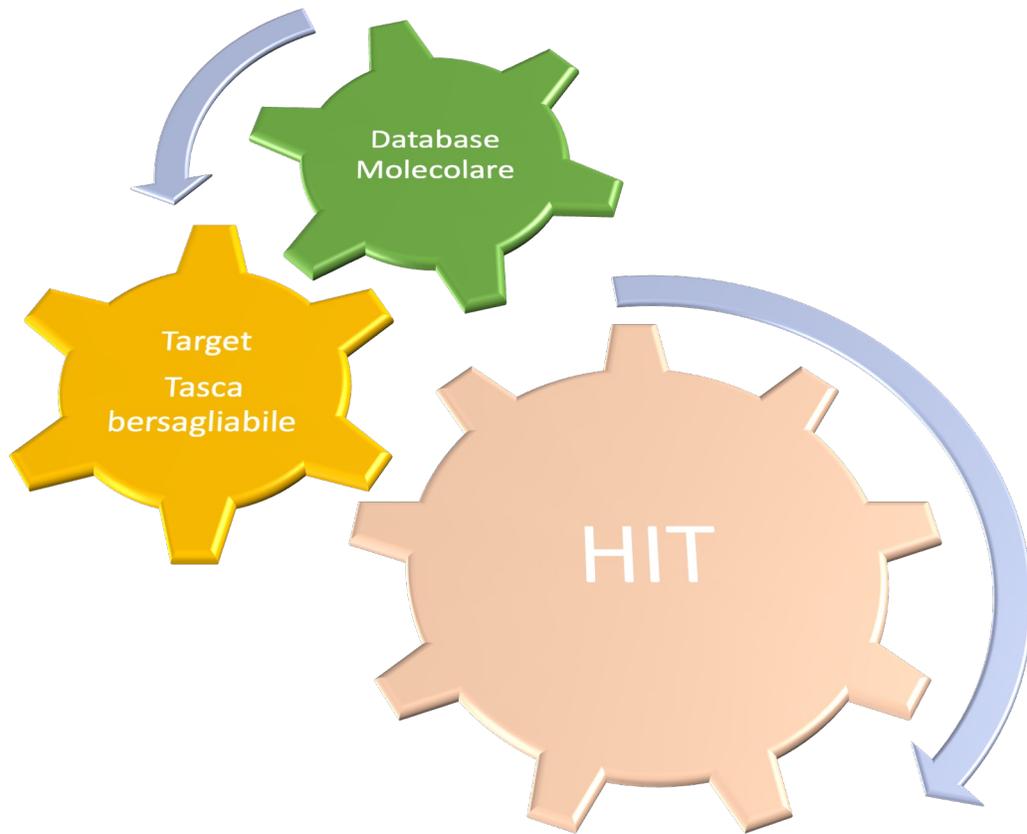
Ricerca delle tasche «bersagliabili»

Pockets identification

Druggability valuation

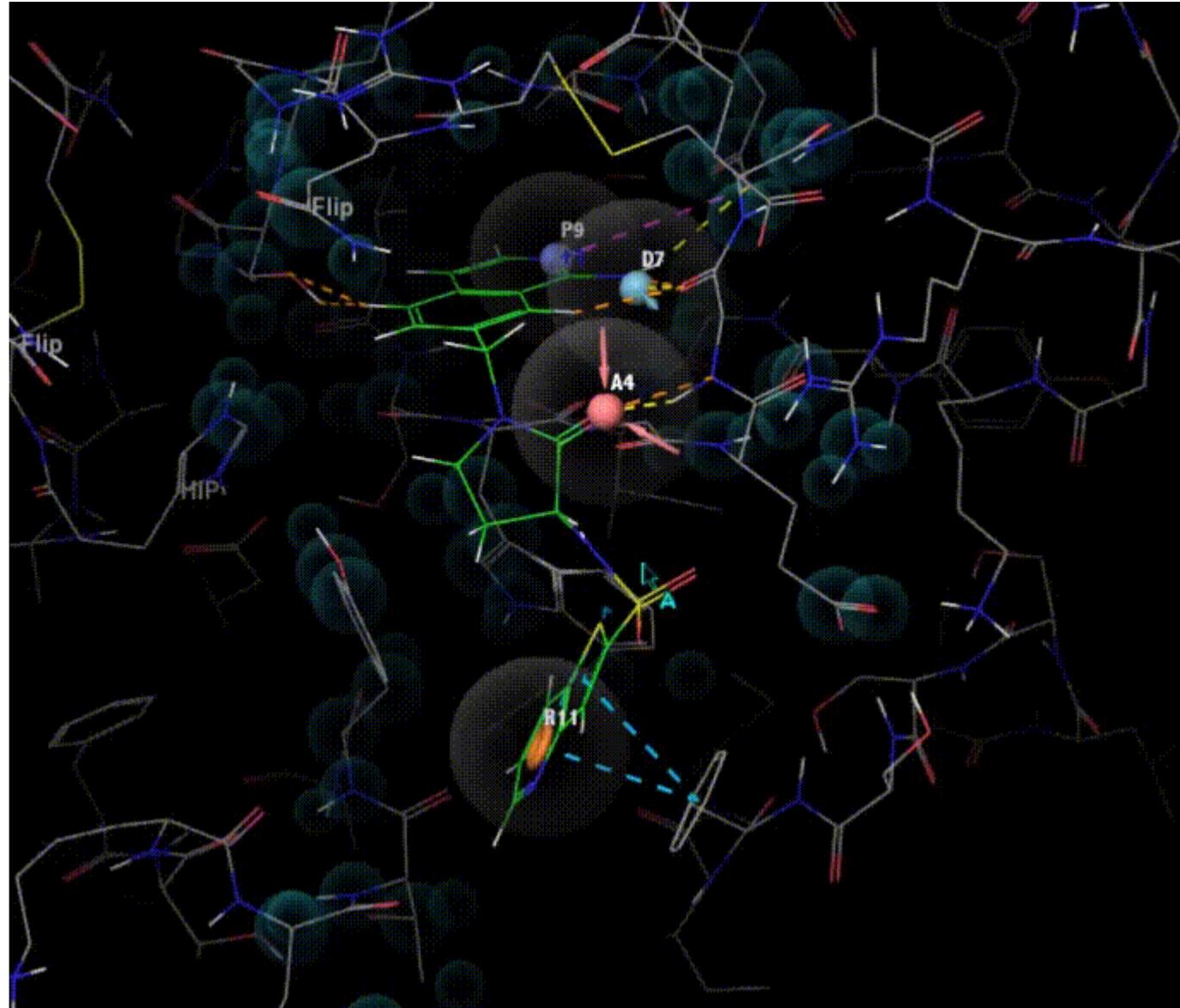


Studi applicativi in ambito farmaceutico (il VS)

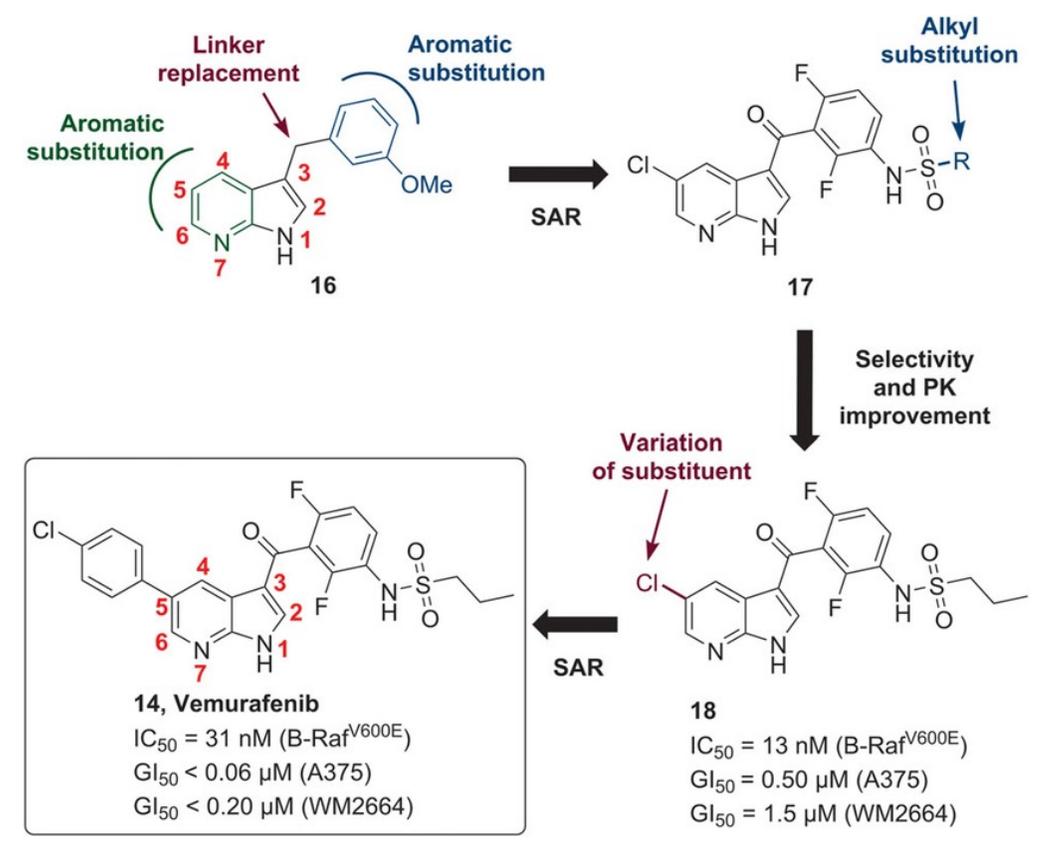
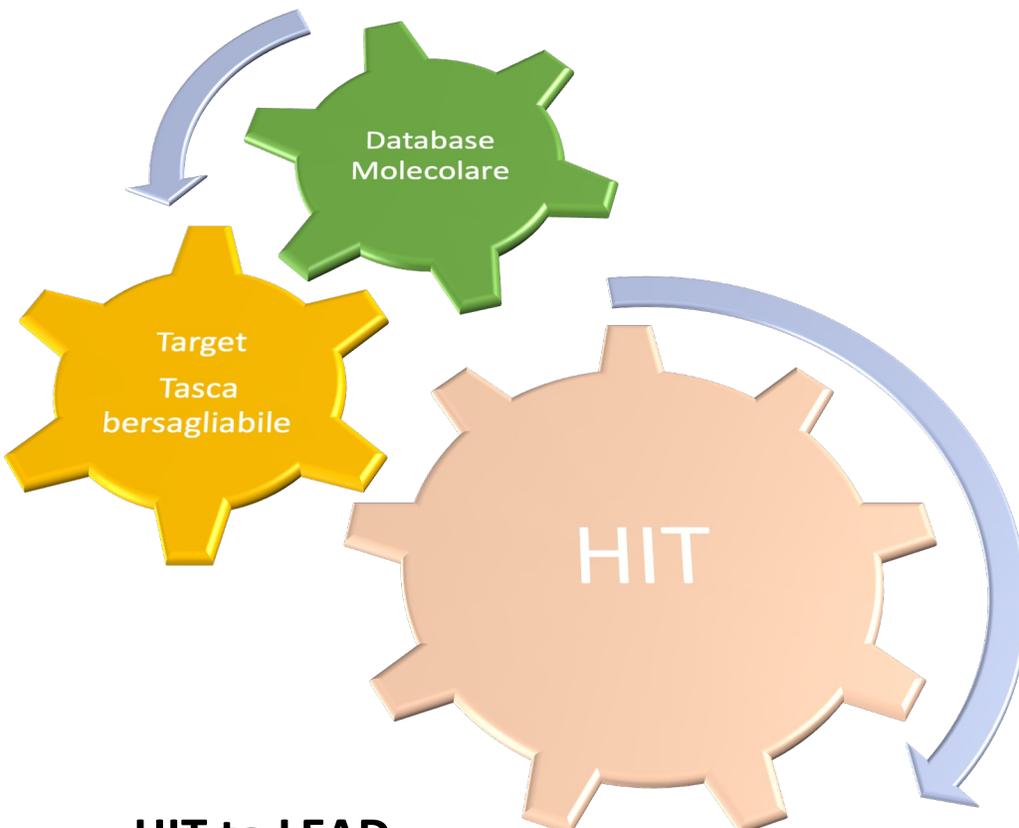


Virtual Screening:

- Pharmacophore based
- High throughput docking
- knowledge based



Studi applicativi in ambito farmaceutico (HIT to LEAD)



HIT to LEAD:

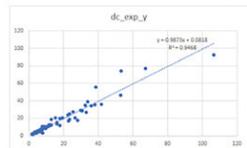
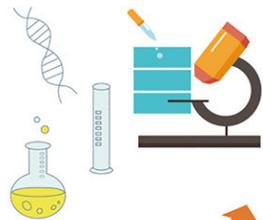
- Docking
- Dinamica Molecolare
- SAR
- QSAR

Studi applicativi in ambito farmaceutico (*in silico* ADMET)

Predizione *in silico* delle proprietà ADMET di composti:

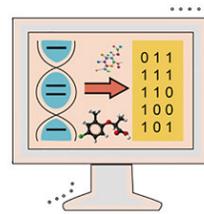
- Mediante software commerciali
- Costruzione di modelli basati su descrittori

Wet Experiment

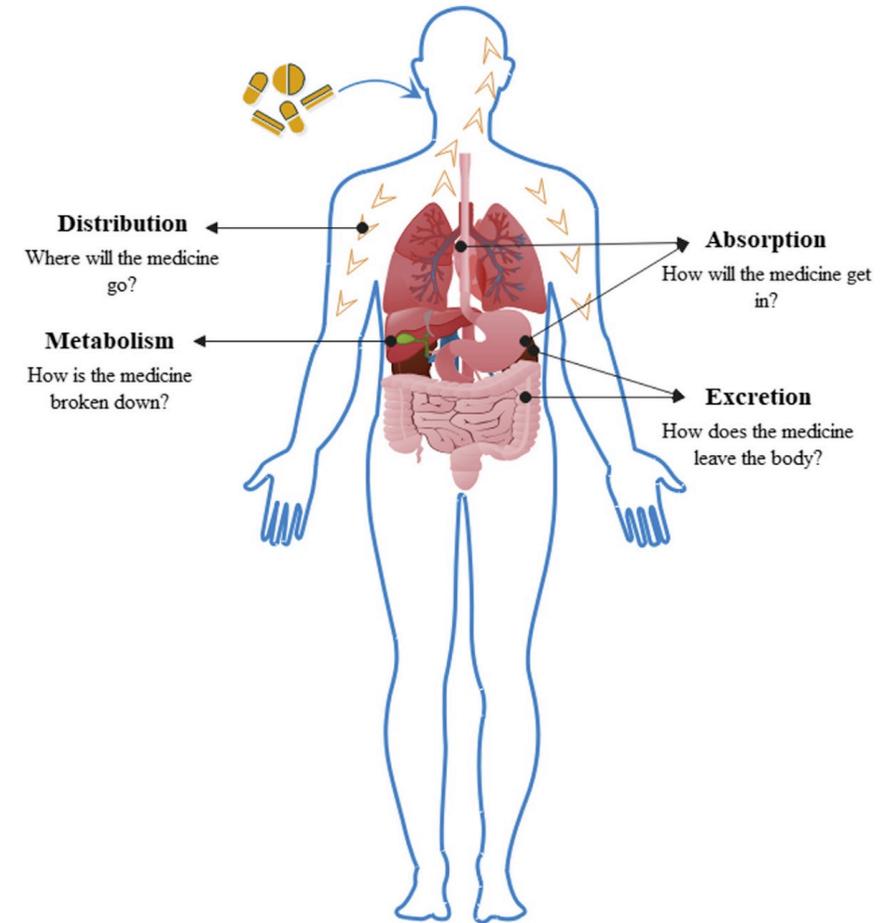


Verification

Molecular Simulation



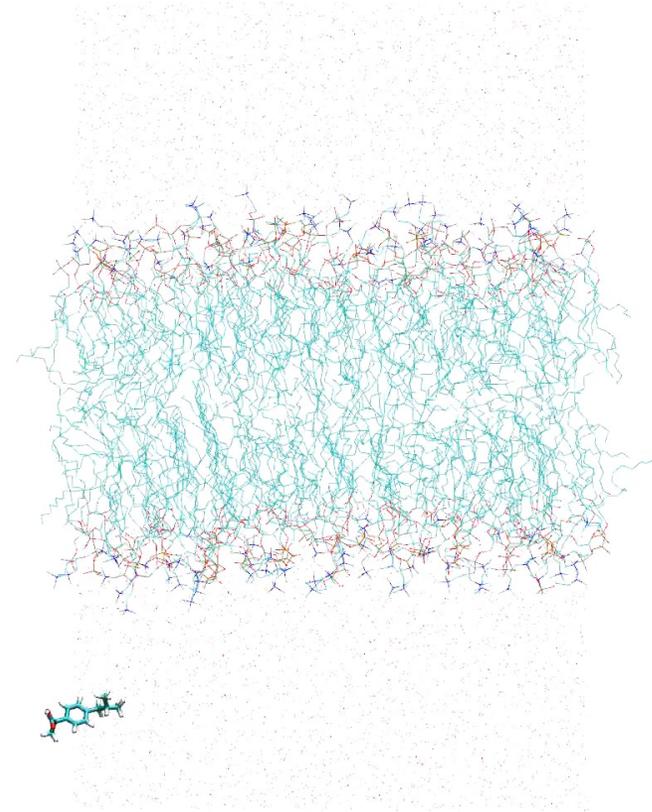
Expert Knowledge



Studi simulativi in ambito farmaceutico

Simulazioni di Dinamica Molecolare

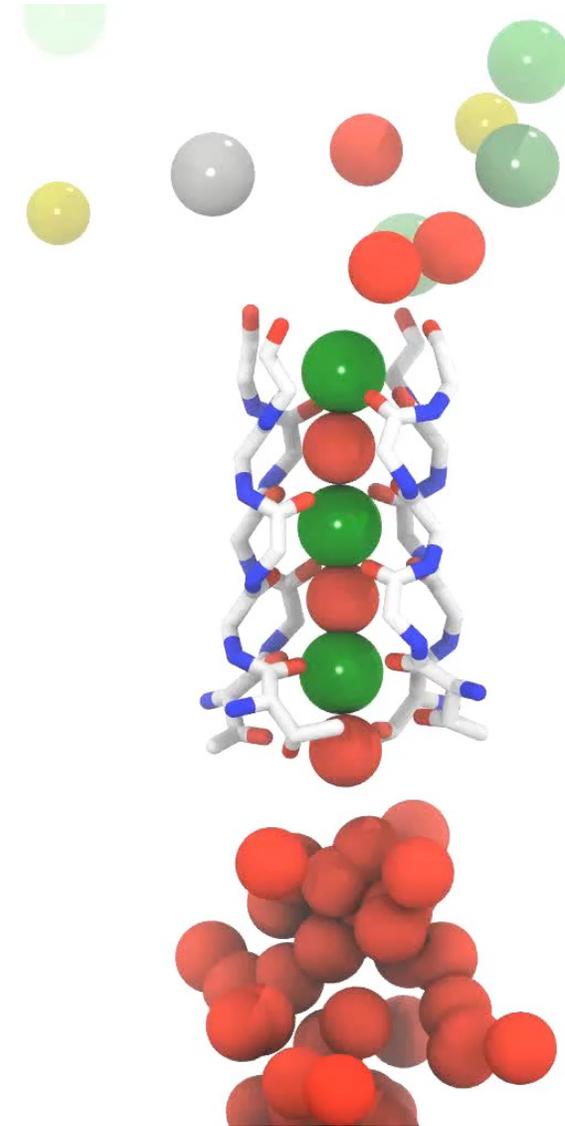
- Predizione di permeabilità membranaria a small molecules



Studi simulativi in ambito farmaceutico

Simulazioni di Dinamica Molecolare

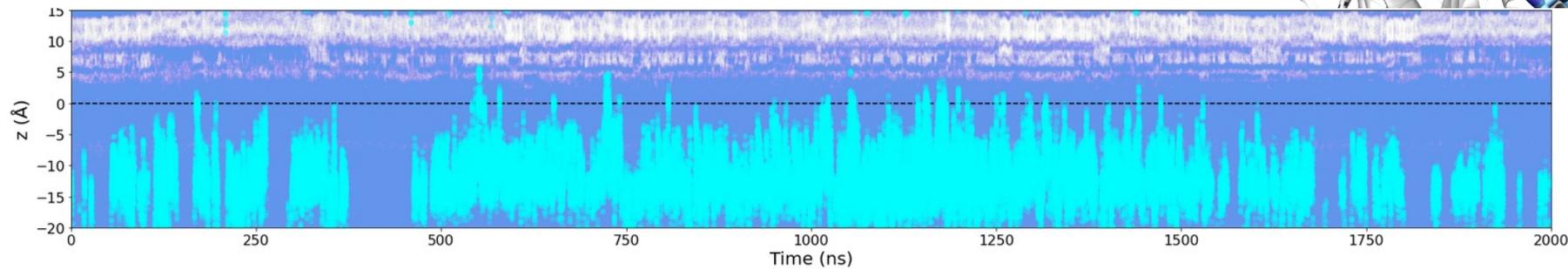
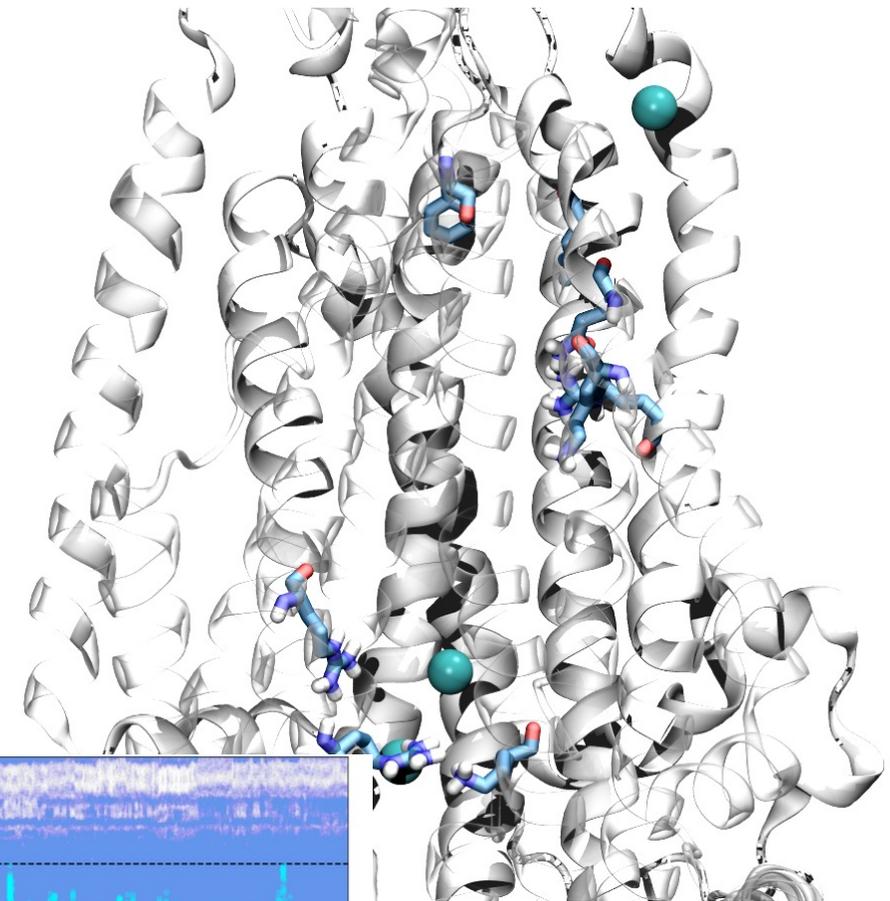
- Predizione di permeabilità membranaria a small molecules
- Studi di permeazione ionica in canali biologici



Studi simulativi in ambito farmaceutico

Simulazioni di Dinamica Molecolare

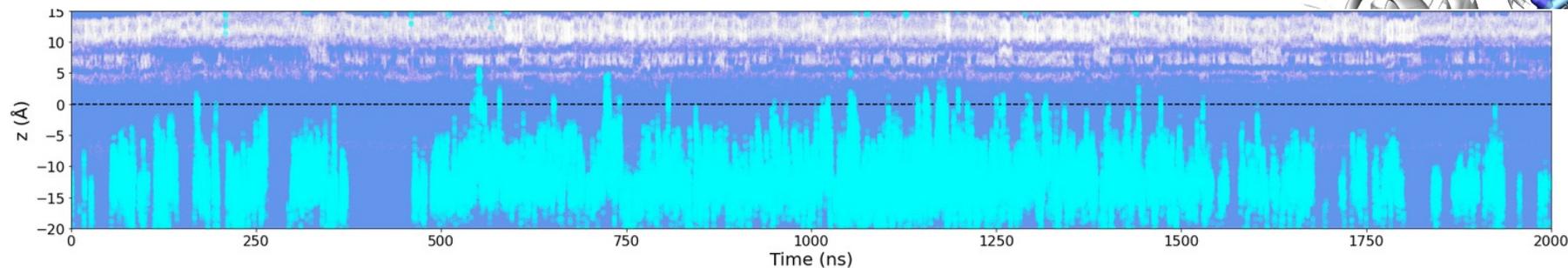
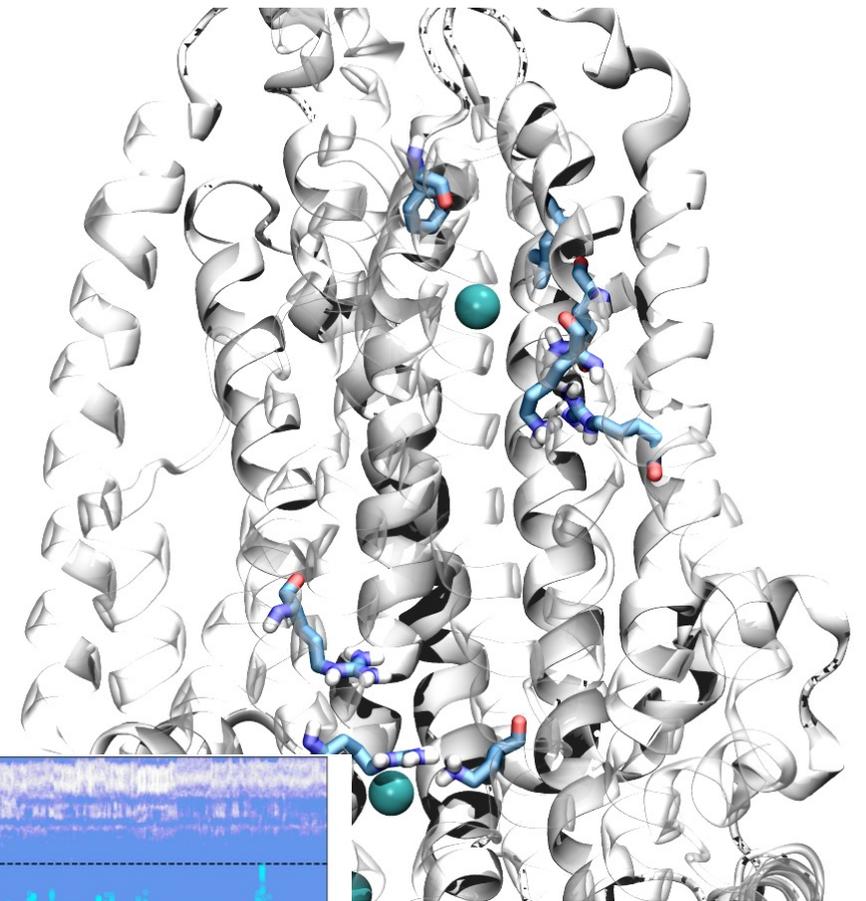
- Predizione di permeabilità membranaria a small molecules
- Studi di permeazione ionica in canali biologici



Studi simulativi in ambito farmaceutico

Simulazioni di Dinamica Molecolare

- Predizione di permeabilità membranaria a small molecules
- Studi di permeazione ionica in canali biologici
- Studi di comunicazione allosterica in target di interesse farmaceutico



Informazioni utili

- Laboratorio: via Gobetti 87
- Durata: circa 6 mesi
- Minor numero di esami possibile (1-2 al massimo)
- Non sovrapponibile con il tirocinio curriculare
- 1 tesista per anno per docente
- Tesi in collaborazione Teorica/Sperimentale?
- Possibilità di fare tesi all'estero?
- Contatti: matteo.masetti4@unibo.it
federico.falchi@unibo.it