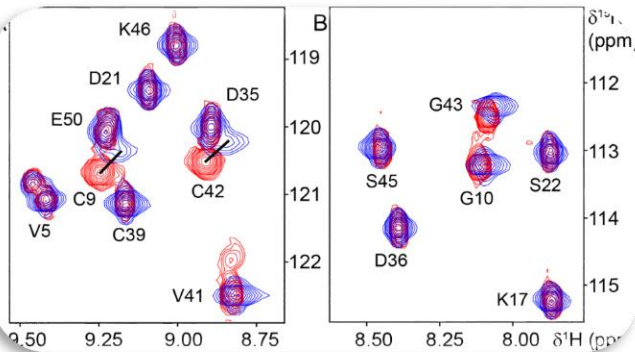


B015921 - INTERAZIONI BIOMOLECOLARI: METODI IN SILICO ED IN VITRO

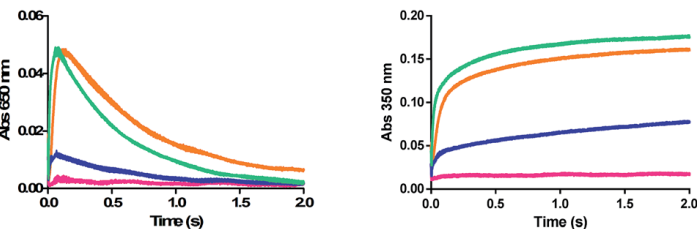
Modulo B015922 - INTERATOMICA: STRUTTURA, TERMODINAMICA E CINETICA

Definizione di interatomica. Principali classi di interazioni che coinvolgono proteine: proteina-ione metallico, proteina-proteina, proteina-piccola molecola, proteina-acido nucleico, proteina-membrana biologica. Metodi per l'individuazione di partner biologici *in vivo* e *in vitro*. Metodi strutturali per lo studio di complessi di proteine con partner biologici. Aspetti cinetici e termodinamici del riconoscimento molecolare.

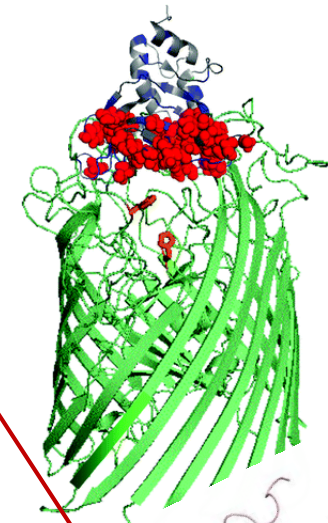
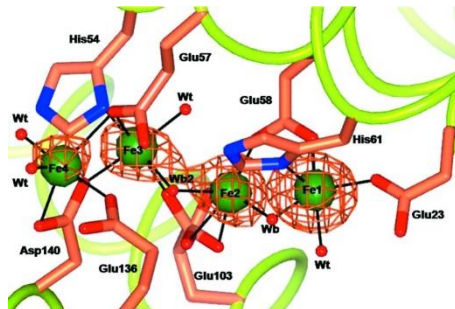
Metodi spettroscopici per lo screening di interazioni



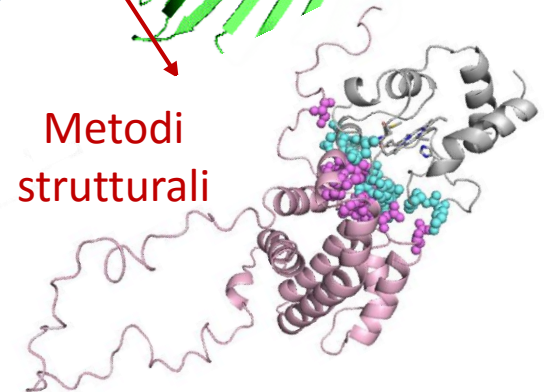
Metodi per ottenere parametri cinetici e termodinamici



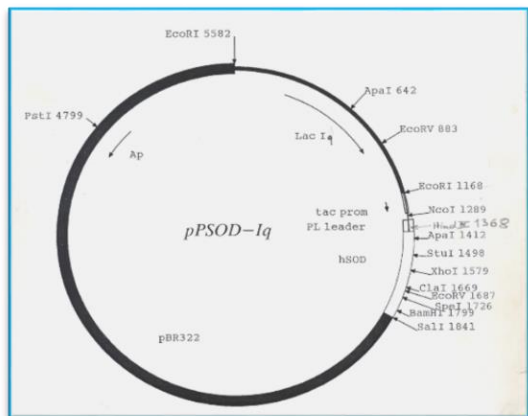
Interazioni biomolecolari che coinvolgono proteine



Metodi strutturali



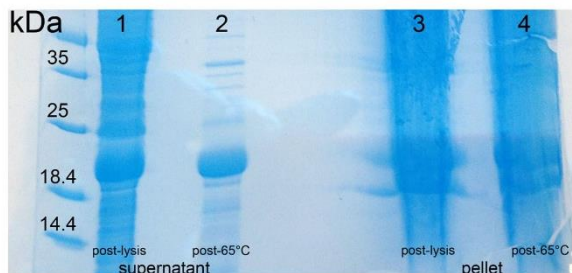
Dal clonaggio del gene di una proteina



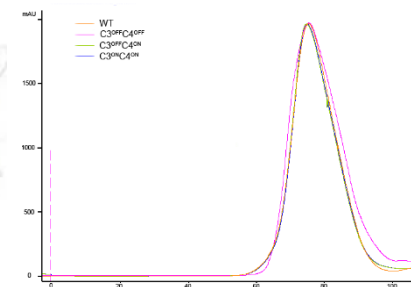
B015921 - INTERAZIONI BIOMOLECOLARI: METODI IN SILICO ED IN VITRO

Modulo B015923 - PROTEINE E LORO INTERAZIONI CON LABORATORIO

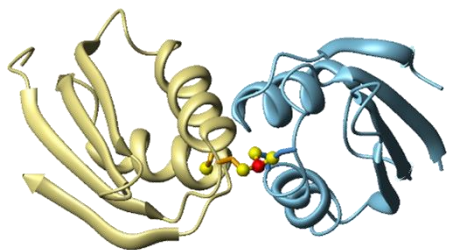
Metodi per il clonaggio, l'espressione e la purificazione di proteine, anche in forma arricchita isotopicamente. Caratterizzazione delle proteine prodotte durante il corso e di alcune loro interazioni attraverso calorimetria, dicroismo circolare, NMR e programmi di *data-driven docking*.



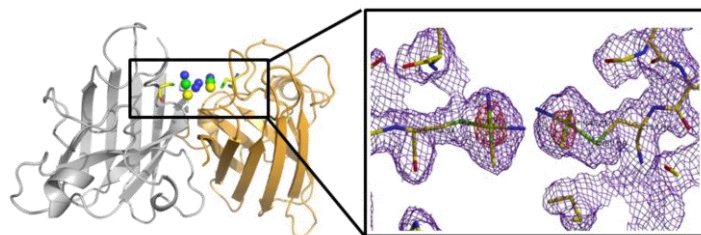
alla sua produzione e purificazione



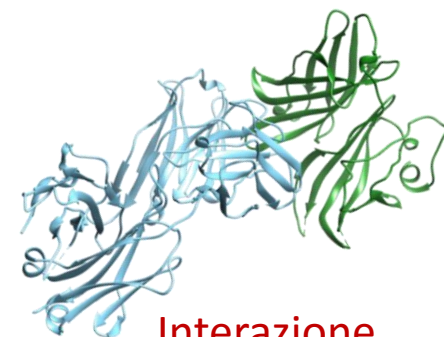
Per lo studio delle sue interazioni tramite metodi in silico e in vitro



Interazione
proteina-proteina



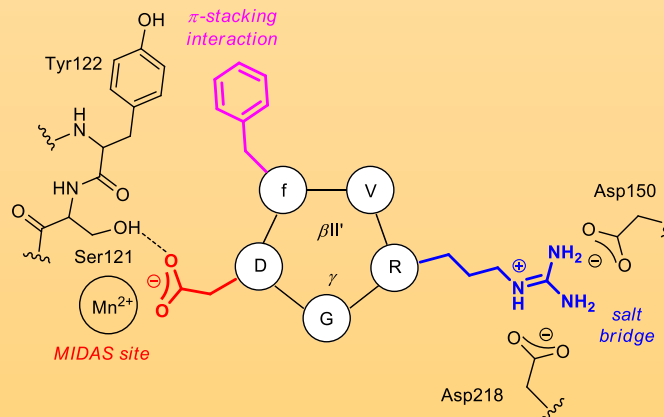
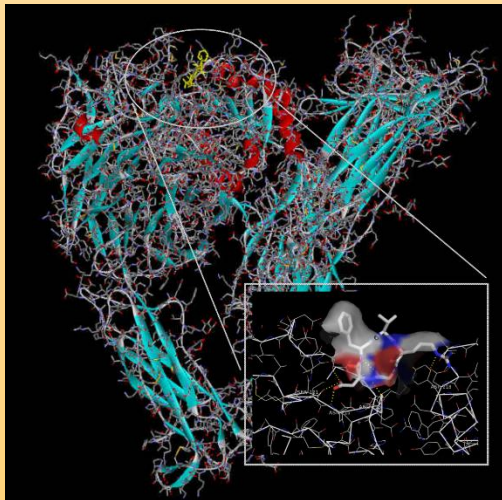
proteina-farmaco



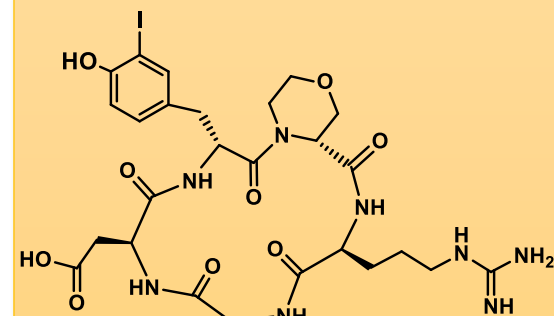
Interazione
proteina-anticorpo

DRUG DISCOVERY

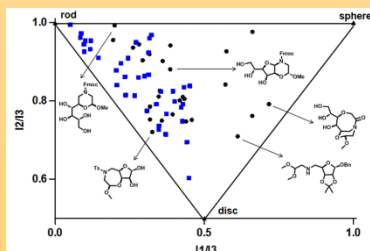
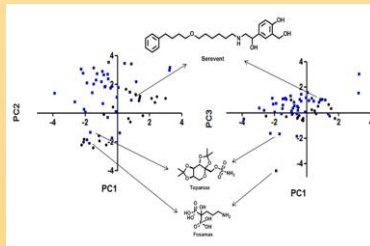
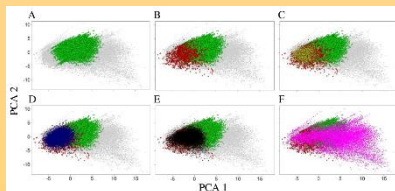
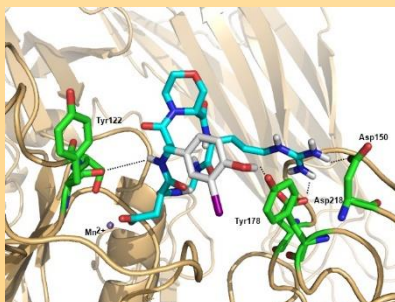
PRINCIPI E TECNICHE DI PROGETTAZIONE



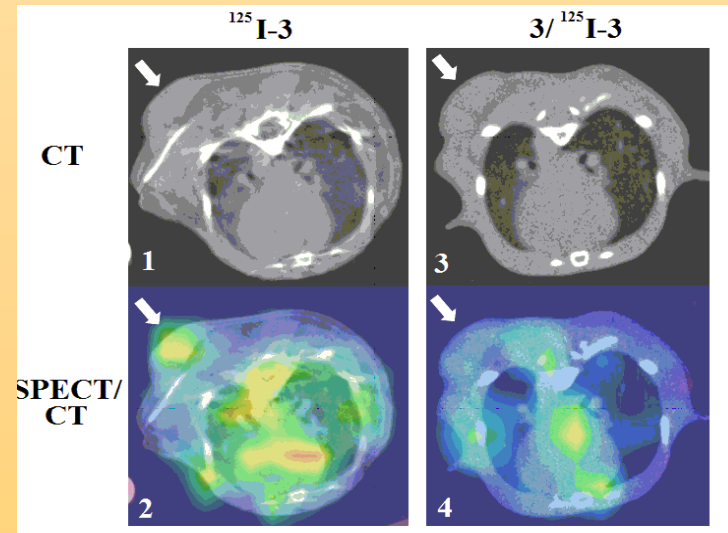
TECNICHE DI SINTESI



METODI DI STUDIO STRUTTURALE



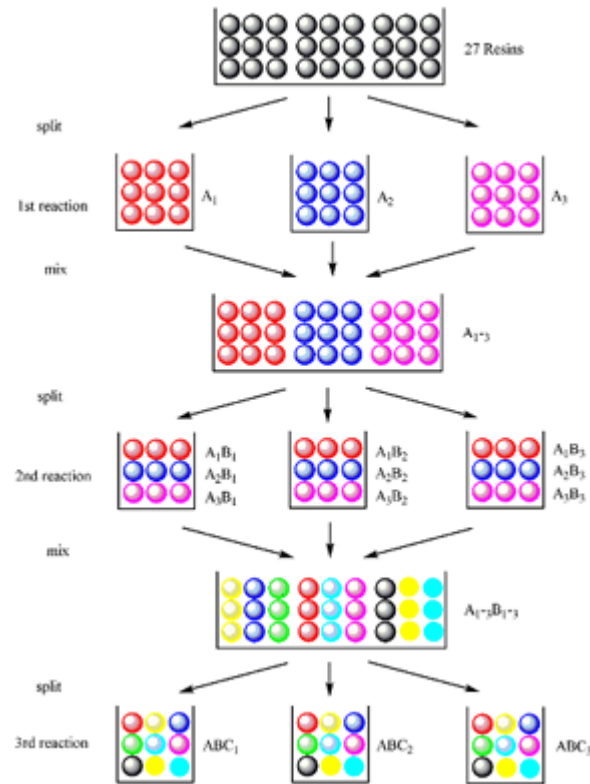
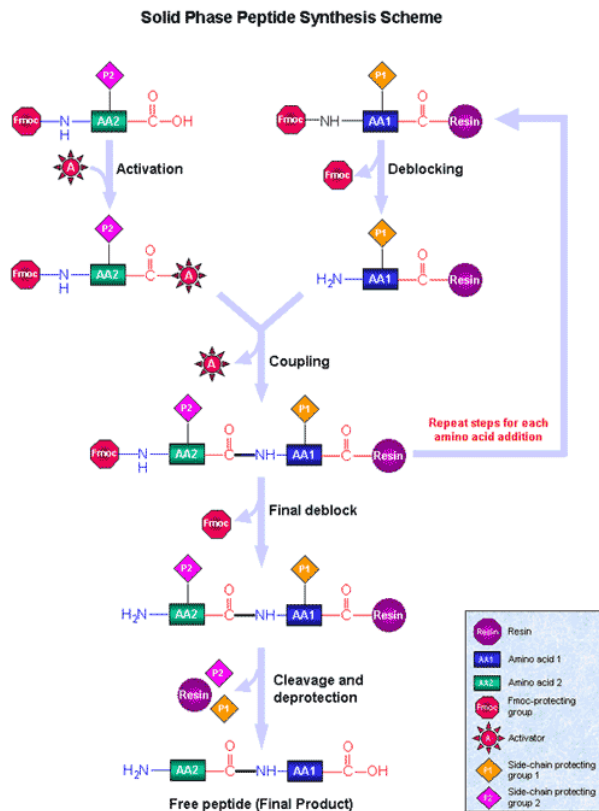
APPLICAZIONI IN MEDICINA



METODOLOGIE DI SINTESI DI MOLECOLE BIOATTIVE

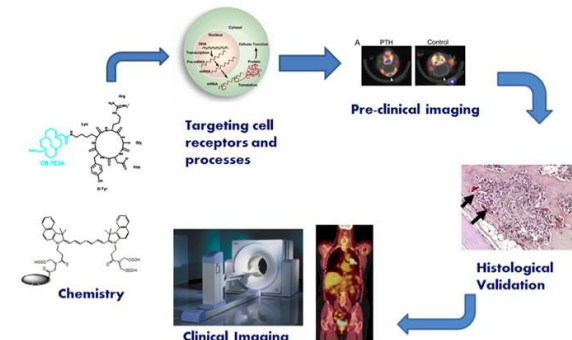
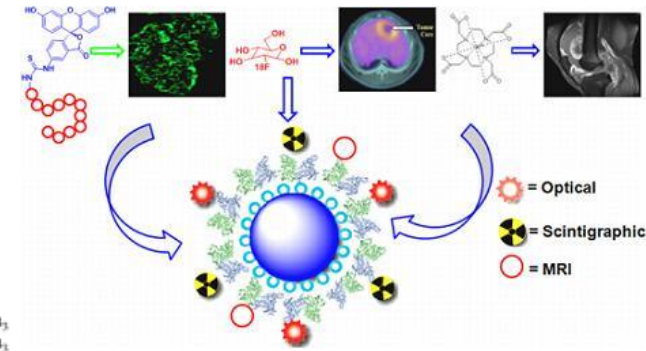
Stereochimica e chiralità: approfondimento dei concetti e della nomenclatura stereochimica. Unità stereogeniche e prostereogeniche. Interazioni non covalenti nel riconoscimento molecolare. Importanza della chiralità nei sistemi biologici. Perché sintetizzare un peptide. Struttura e proprietà di amminoacidi e peptidi. Gruppi protettori dell'azoto: inserimento e rimozione. Possibili reazioni secondarie. Gruppi protettori del gruppo carbossilico e dei gruppi reattivi presenti sulle catene laterali. Metodi di attivazione e di coniugazione. Possibili fenomeni di racemizzazione. Metodi di sintesi su fase solida. Resine e condizioni di distacco. Strategie di sintesi peptidica combinatoriale. Preparazione di librerie di composti organici e metodi di screening biologico. Tecniche di bioconiugazione. Creazione di gruppi funzionali specifici. Reagenti di bioconiugazione.

SINTESI PEPTIDICA



PREPARAZIONE DI LIBRERIE DI COMPOSTI

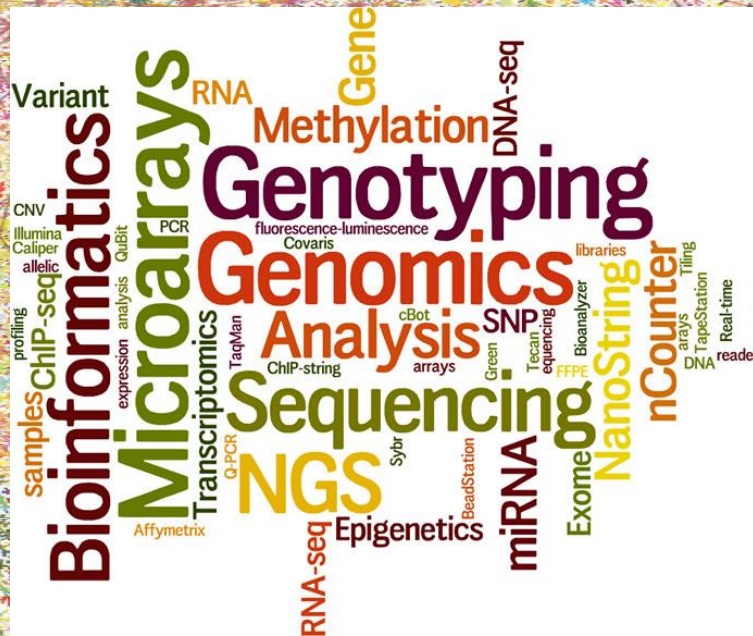
METODI DI BIOCONIUGAZIONE

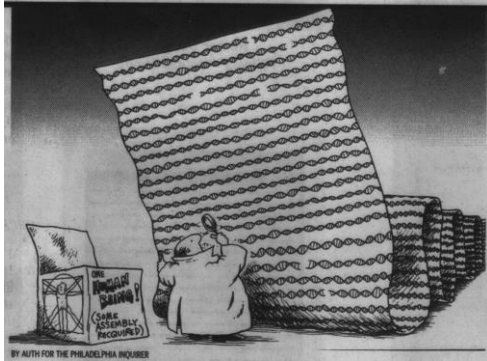


The Cycle of Molecular Imaging

B015928 - GENOMICA

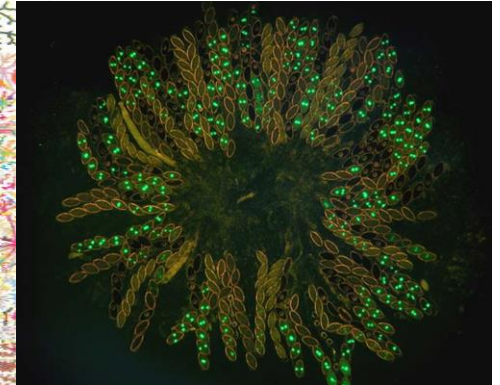
Tecniche e strategie per il mappaggio ed il sequenziamento dei genomi. Genomica comparata. Evoluzione dell'architettura dei genomi. Principi di analisi di genomica funzionale. Trascrittomica. Banche dati. Analisi mediante reti. Predizione computazionale delle reti geniche. Tecniche di indagine high throughput di fenotipi cellulari. Modellizzazione metabolica da dati genomici. Genomica di popolazione. Analisi statistica della variabilità genomica. Metagenomica. Tecniche bioinformatiche per lo studio della struttura e della funzione del genoma.



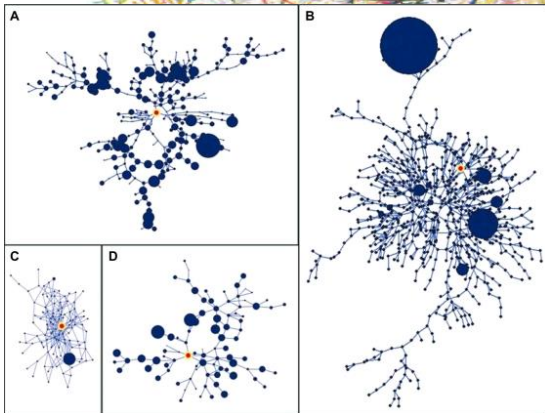


Sequenziamento dei genomi

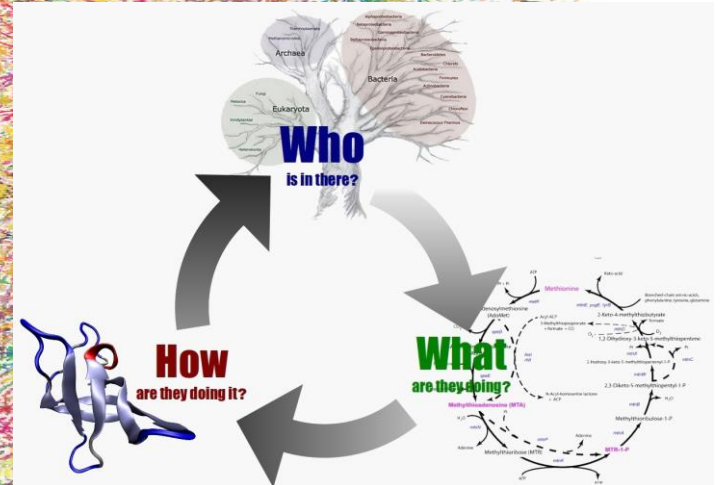
Funzione dei genomi



Interpretazione dei genomi



Modelli dai genomi



MODELLISTICA APPLICATA A MOLECOLE DI INTERESSE BIOLOGICO

Corso teorico: Basi termodinamico-stratistiche dell'interazione farmaco-proteina. Parametrizzazione energetica, force fields e trasferibilità. Insieme canonico. Funzione di partizione molecolare. Calcolo delle costanti di affinità farmaco-proteina attraverso la fattorizzazione della funzione partizione. Entalpia ed entropia di binding.

Laboratorio informatico: Esercitazione individuale su piattaforma linux. Accesso ed uso dei database pubblici per strutture di proteine (PDB) e farmaci (PUBCHEM). Set up del sistema farmaco-proteina con s/w di visualizzazione grafica (vmd). Calcolo delle energia libere delle strutture (pose) elaborate e visualizzate mediante applicativi s/w di meccanica molecolare.

$$\Delta G_d = \Delta \mathcal{E}_d - 3RT \ln \left(\frac{8\Delta \mathcal{E}_d}{RT} \right) - RT \ln \left(\frac{\pi^{-1} V_0 V_L}{V_{\text{site}}^2} \right)$$

