

CORSO DI STUDIO *Bioinformatica*

ANNO ACCADEMICO 2023-2024

DENOMINAZIONE DELL'INSEGNAMENTO PROGETTAZIONE DI MOLECOLE BIOATTIVE

Principali informazioni sull'insegnamento	
Anno di corso	<i>II</i>
Periodo di erogazione	<i>Primo semestre</i>
Crediti formativi universitari (CFU/ETCS):	<i>6</i>
SSD	<i>CHIM/08</i>
Lingua di erogazione	<i>italiano</i>
Modalità di frequenza	<i>obbligatoria</i>

Docente	
Nome e cognome	<i>Orazio Nicolotti</i>
Indirizzo mail	<i>orazio.nicolotti@uniba.it</i>
Telefono	<i>080 5442551</i>
Sede	<i>Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco</i>
Sede virtuale	Codice TEAMS: x41rz1k
Ricevimento	Tutti i giorni previo contatto email

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
<i>150</i>	<i>32</i>	<i>30</i>	<i>88</i>
CFU/ETCS			
<i>6</i>	<i>4</i>	<i>2</i>	

Obiettivi formativi	Fornire le conoscenze di base sulla progettazione dei farmaci e sulle relazioni struttura attività
Prerequisiti	Chimica generale, chimica organica, farmacologia.

Metodi didattici	<i>Didattica frontale integrata con esercitazioni in aula.</i>
Risultati di apprendimento previsti DD1 Conoscenza e capacità di comprensione DD2 Conoscenza e capacità di comprensione applicate DD3-5 Competenze trasversali	<ul style="list-style-type: none">○ <i>Acquisizione dei metodi di base per la progettazione di molecole di interesse farmacologico o diagnostico</i> ○ <i>Utilizzazione di metodologie e piattaforme tecnologiche specifiche (modellistica molecolare) per l'identificazione di bersagli molecolari di interesse biotecnologico.</i> ○ <i>Capacità di giudizio critico</i>○ <i>Capacità espositiva</i>○ <i>Capacità di studio autonomo</i>

Contenuti di insegnamento (Programma)	Interazioni fondamentali tra molecole. Forze di van der Waals. Effetto idrofobico. Interazioni ioniche. Interazioni dipolari. Descrittori molecolari 1D, 2D e 3D. Relazione Quantitativa Struttura-Attività/Proprietà. Rappresentazione e catalogazione molecolare 1D, 2D e 3D. Ricerche in database. Similarità e diversità molecolare. Analisi in componenti principali, analisi cluster, algoritmi genetici, tecniche di ottimizzazione multiobiettivo. Disegno sperimentale. Dominio di applicabilità. Elementi di tossicologia predittiva. Modelli di farmacoforo. Modelli QSAR. Equazione di Hansch. Equazione Free-Wilson. Craig Plot, CoMFA, GRID. Meccanica molecolare. Analisi Conformazionale. Struttura tridimensionale di proteine e sito attivo. Protein Data Bank, Interazione Proteina-Molecola, Docking molecolare. Dinamica molecolare. Progettazione de novo. Virtual screening.
Testi di riferimento	<ul style="list-style-type: none"> R. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications, Pearson Education EMA Graham L. Patrick; Introduzione alla Chimica farmaceutica (EdiSES)
Note ai testi di riferimento	
Materiali didattici	<i>Classe Teams.</i>
Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	<i>Colloquio orale</i>

Criteri di valutazione	<ul style="list-style-type: none">• <i>Conoscenza e capacità di comprensione</i>• <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate</i>• <i>Autonomia di giudizio</i>• <i>Abilità comunicative</i>• <i>Capacità di apprendere</i>
Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale	<i>Il voto finale terrà conto dei criteri di valutazione sopra elencati.</i>

Altro	

COURSE OF STUDY ACADEMIC *Bioinformatics*

YEAR 2023-2024

ACADEMIC SUBJECT *Design of bioactive molecules*

General information	
Year of the course	II year
Academic calendar (starting and ending date)	First semester
Credits (CFU/ETCS):	6
SSD	CHIM/08
Language	Italian
Mode of attendance	Compulsory

Professor/ Lecturer	
Name and Surname	Orazio Nicolotti
E-mail	orazio.nicolotti@uniba.it
Telephone	080 5442551
Department and address	Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco
Virtual room	TEAMS code: x41rz1k
Office Hours (and modalities: e.g., by appointment, on line, etc.)	Anytime by mail contact

Work schedule			
Hours			
Total	Lectures	Hands-on (laboratory, workshops, working groups, seminars, field trips)	Out-of-class study hours/ Self-study hours
150	32	30	88
CFU/ETCS			
6	4	2	

Learning Objectives	<i>Learning about main methods for the design of molecules of pharmacological or diagnostic interest.</i>
Course prerequisites	<i>Inorganic chemistry, organic chemistry, pharmacology.</i>

Teaching strategie	
Expected learning outcomes in terms of	
Knowledge and understanding on:	<ul style="list-style-type: none"> ○ <i>Learning about main methods for the design of molecules of pharmacological or diagnostic interest.</i>
Applying knowledge and understanding on:	<ul style="list-style-type: none"> ○ <i>Use of specific methodologies and technological platforms (molecular modeling) for the identification of molecular targets of biotechnological</i>
Soft skills	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Making informed judgments and choices</i> • <i>Communicating knowledge and understanding</i> • <i>Capacities to continue learning</i>

Syllabus	
Content knowledge	<i>Fundamental interactions between molecules. Van der Waals forces. Hydrophobic effect. Ionic interactions. Dipolar interactions. 1D, 2D and 3D molecular descriptors. Quantitative Structure-Activity / Property Relationship. 1D, 2D and 3D molecular representation. Database searching. Similarity and molecular diversity. Principal component analysis, cluster analysis, genetic algorithms, multi-objective optimization techniques. Experimental design. Applicability domains. Basic of predictive toxicology. Pharmacophore models. QSAR models. Hansch equation. Free-Wilson equation. Craig Plot, CoMFA, GRID. Molecular mechanics. Conformational Analysis. Three-dimensional structure of proteins and active site. Protein Data Bank, Protein-Molecule Interaction, Molecular Docking. Molecular dynamics. De novo design. Virtual screening.</i>
Texts and readings	<ul style="list-style-type: none"> • R. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications, Pearson Education EMA • Graham L. Patrick; Introduzione alla Chimica farmaceutica (EdiSES)
Notes, additional materials	
Repository	

Assessment	
Assessment methods	Interview
Assessment criteria	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Knowledge and understanding</i> • <i>Applying knowledge and understanding</i> • <i>Autonomy of judgment</i> • <i>Communicating knowledge and understanding</i> • <i>Communication skills</i> • <i>Capacities to continue learning</i>
Final exam and grading criteria	<i>The final score will account of the evaluation criteria above mentioned.</i>
Further information	
	.