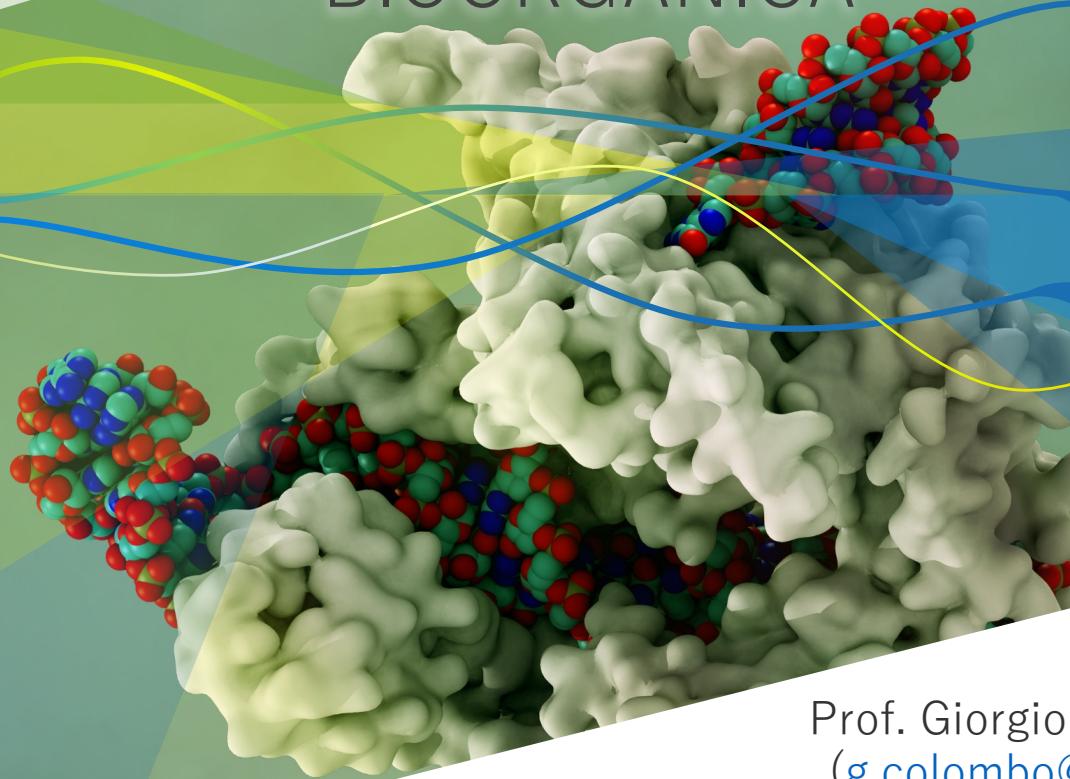


METODI COMPUTAZIONALI E DESIGN MOLECOLARE IN CHIMICA BIOORGANICA



UNIVERSITÀ
DI PAVIA

Docente

Prof. Giorgio Colombo
[\(g.colombo@unipv.it\)](mailto:g.colombo@unipv.it)

Lo scopo del corso è di presentare le principali tecniche computazionali per l'analisi e la progettazione della struttura tridimensionale, della dinamica e dei meccanismi funzionali di sistemi biomolecolari.

Queste tecniche, che vanno dalla simulazione molecolare basata su concetti chimico-fisici fino all'apprendimento automatico e al deep learning, giocano un ruolo sempre più rilevante nella progettazione di nuovi farmaci (drug discovery), nella bioingegneria e nella realizzazione di nuove nano-strutture biologiche.

Gli argomenti del corso includono lo studio della progettazione di farmaci, della struttura e dinamica di proteine e dei meccanismi di riconoscimento proteina-ligando e proteina-proteina. Verranno inoltre presentati i principali metodi di simulazione molecolare, drug design, protein design, metodi basati sull'intelligenza artificiale per la progettazione molecolare.

Durante il corso, verranno presentati e discussi criticamente articoli che descrivono i più importanti sviluppi della ricerca in questi campi.

Il corso si terrà al I semestre: le lezioni saranno il lunedì (14-16) e il venerdì (11-13) in aula CO2, sezione di Chimica Organica.

Una **riunione preliminare** di presentazione si terrà il **21 Settembre ore 11.00 Aula CO2, Chimica Organica** e online al link:

<https://us02web.zoom.us/j/88936906009?pwd=QysvdGZIdVpQSXFmZUdpb1pYZm1hZz09>