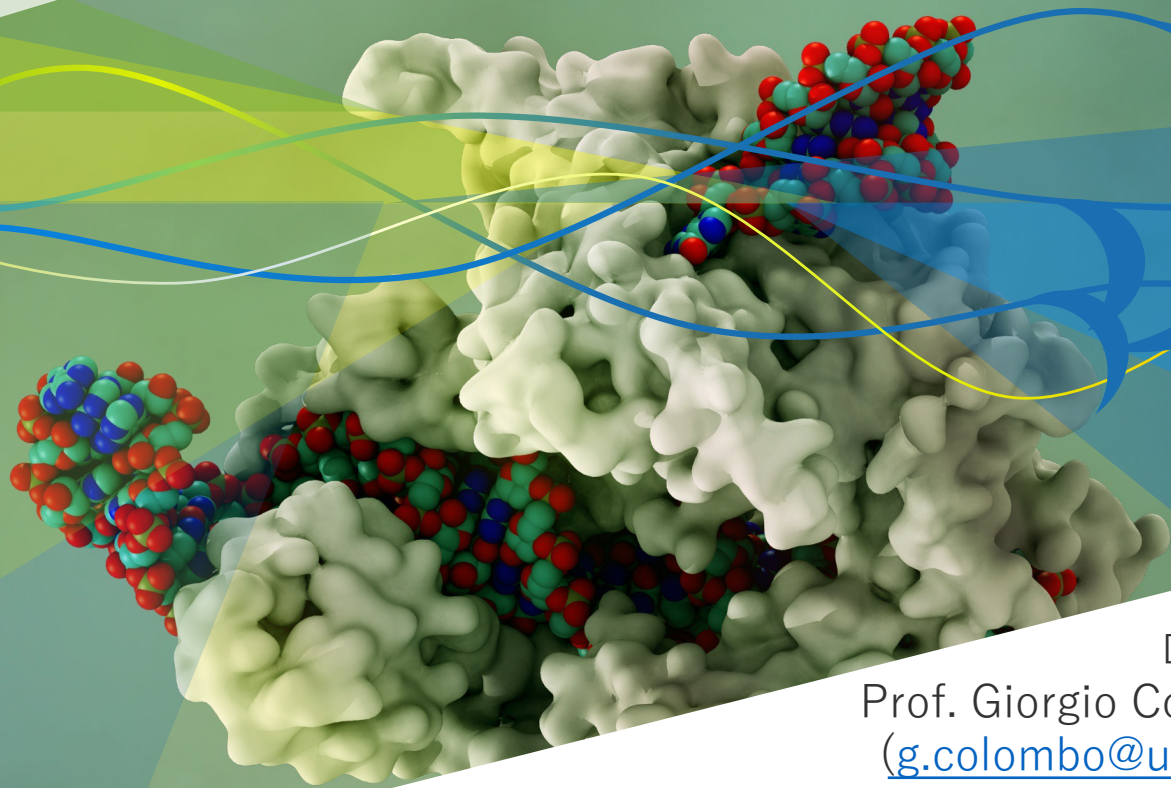


CHIMICA AL COMPUTER: DALLA PROGETTAZIONE DI FARMACI ALLA SIMULAZIONE DI SISTEMI BIOCHIMICI



Docente
Prof. Giorgio Colombo
(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 giovedì (11-13) in aula CO2, sezione di Chimica Organica, a partire dal 30 settembre 2024.

PRESENTAZIONE DEL CORSO: 16 Settembre alle 15.00 aula CO2 e 27 Settembre alle 11.00 aula CO2, Sezione Chimica Organica. Online:

<https://zoom.us/j/97638357107?pwd=esJLvACv3TUM6Z5l6jUTuUtMUO86dL.1>