

**MASTER IN BIOINFORMATICA (2019-2020)**  
**M1 Percorso di ricerca ISDD:**  
**Progettazione di molecole bioattive (diploma francese o doppio diploma franco-italiano)**

**SEMESTRE S1 UNIVERSITÀ DI STRASBURGO (30 ECTS)**

**UE1 METODOLOGIA (10 ECTS)**  
**Responsabile : G. MARCOU, DALBAVIA J. O., GIUSEPPONE N.**

**Titolo :** Metodologia

**Consulente di facoltà :** G. Marcou, J.O. Dalbavie, N. Giuseppone

**Programma:** Sistemi operativi e reti

Componenti e periferiche di un PC. L'ambiente DOS/Windows7/Linux. Amministrazione. Principi dei sistemi operativi. Interfacce di controllo e script di automazione. Reti locali, TCP/IP. Script di shell: il bash

Competenze specifiche :

Smontaggio/rimontaggio delle attrezzature. Installazione del sistema. Reti. Sicurezza Scrivere ed eseguire uno script

**Programma:** Metodi statistici

Statistiche descrittive, Test statistici, Analisi della varianza con un fattore, Regressione semplice e multipla, Regressione passo-passo, Analisi dei componenti principali, Metodi avanzati: Partial Least Square (PLS) e Regressione logistica.

Competenze specifiche :

Applicazione in casi concreti di chimica. Uso di EXCEL per analisi statistiche.

**Programma:** Chimica organica

Informazioni generali sui composti organici. Connessioni, conformazioni, stereochimica. Reazioni e meccanismi di reazione. Alcani, alcheni, alchini e idrocarburi ciclici. Derivati alogenati. Alcoli, epossidi, ossidi di etere, tioli, tioeteri, ammine. Aldeidi, chetoni, acidi carbossilici e derivati. Areni.

**UE2 MODELLAZIONE MOLECOLARE (8 ECU)**  
**Responsabile:**

**Titolo :** Modellazione molecolare

**Consulente di facoltà :**

**Programma:** Modellazione Molecolare

Introdurre tre approcci complementari alla modellazione delle architetture molecolari: indagini di banche dati, costruzione e minimizzazione tramite metodi di campo di forza e meccanica quantistica.

Competenze specifiche :

Metodi dei campi di forza. Utilizzo di banche dati strutturali. Panoramica dei metodi di chimica quantistica.

**Programma:** TP di Modellazione

Modellazione della struttura e delle proprietà delle molecole organiche (chimica quantistica, meccanica e dinamica molecolare, chemioinformatica). Software di modellazione.

Competenze specifiche :

Campionamento conforme. Calcoli teorici dei parametri molecolari. Ricerca strutturale nella banca dati CCDC.

**Programma: Introduzione alla chimica terapeutica**

Conoscenze e obiettivi condivisi da chimici, fitochimici e biologi in merito alle sostanze attive. Natura chimica e genesi dei principi attivi. Proprietà fisico-chimiche e metabolismo dei principi attivi. Produzione. Controllo. Il mondo della medicina.

Competenze specifiche :

Strategie e metodi per l'identificazione e l'ottimizzazione dei principi attivi. Industria farmaceutica e R&S.

**UE3 CHEMIOINFORMATICA (10 ECTS)**

**Responsabile:**

**Titolo :** Chemioinformatica

**Consulente di facoltà :**

**Programma I :**

Rappresentazione di strutture tramite computer (1D, 2D, 3D). Elementi della teoria dei grafici. Catene SMILES e InChi. Impronte digitali molecolari. Farmacofori. Formati MOL, SDF, RXN e RDF. Ricerca strutturale e sub-strutturale. Analisi conformazionale. Somiglianza e diversità delle molecole.

Competenze specifiche :

Creare/gestire i dati chimici utilizzando un software commerciale. Elaborazione, creazione di dati chimici.

**Programma II :**

Descrittori molecolari (1D, 2D, 3D). Metodi struttura-attività (QSAR/QSPR). QSAR in 3D: analisi comparativa dei campi molecolari ("CoMFA"). Screening virtuale e progettazione "*in silico*" di nuovi composti. Filtri. Docking.

Competenze specifiche :

Essere in grado di selezionare descrittori rilevanti, ottenere modelli QSAR e utilizzarli per lo screening virtuale.

**Programma: Diversità chimica *in silico***

Banche dati di chimica. Somiglianza e diversità delle molecole. Spazio chimico. Metodi di clustering. Preparazione di vari set di dati. Generazione di librerie chimiche combinatorie.

Competenze specifiche :

Creare e gestire una banca dati chimica. Analizzare il contenuto qualitativamente. Proporre "nuovi" composti.

**UE4 COMUNICAZIONE (2 ECTS)**

**Responsabile:**

**Titolo :** Comunicazione

**Consulente di facoltà :**

**Programma: Inglese Disciplinare**

Stage intensivo di inglese all'inizio del semestre, supportato da lezioni e compiti in inglese. Comprensione, espressione, pronuncia. + Corsi di lingua inglese autodidattici in cui gli studenti utilizzano risorse su Internet o risorse installate sui computer.

Competenze specifiche :

Comprendere articoli e conferenze in inglese. Padronanza del significato delle parole usate. Pronuncia comprensibile.

**Programma: Conferenze**

Cicli di conferenze tenute da rinomati ricercatori e industriali. Esempi: Artem Cherkasov (Vancouver, Canada), Alexandre Tropsha (Chapel Hill, USA), Joao Aires de Susa (Lisbona), Markus Gastreich (BiosolvIT), Philippe Vayer (Servier).

Competenze specifiche :

Avere uno sguardo obiettivo sullo stato delle conoscenze in chemioinformatica e Drug Design.

Programma: **Presentazione di articoli**

Lavoro bibliografico e analisi degli articoli

**SEMESTRE S2 UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO (30 ECTS)**

**UE1 PROGRAMMAZIONE IN C (6 ECTS)  
Coordinatore: C. LORENZO**

**Titolo : Programmazione in C**

**Coordinatore didattico : C. Lorenzo**

**Programma :**

Aspetti di base della programmazione in C. Linguaggio per analisi numeriche e statistiche. Generalità sui linguaggi di programmazione. File sorgente e file eseguibili. Compilatori. Tipi variabili. Operazioni di input-output. While and for loops. Costruzioni condizionali. Puntatori. Manipolazione degli array. Manipolazione delle stringhe.

**Competenze specifiche :**

Per poter scrivere ed eseguire semplici codici in C

**UE2 BIOLOGIA ED ENZIMOLOGIA STRUTTURALE (6 ECTS)  
Coordinatore : M. VANONI**

**Titolo : Biologia strutturale ed enzimologia**

**Coordinatore didattico : M. Vanoni**

**Programma :**

**Biologia strutturale ed enzimologia** Introduzione all'identificazione di bersagli molecolari dei farmaci mediante tecniche bioinformatiche, genomiche, trascrittomiche e proteomiche. Criteri per la convalida dei target farmacologici. Riconoscimento molecolare e natura dei siti di legame al legante. Struttura-funzione

**Tecniche di sintesi applicate alla progettazione e sintesi di principi biologicamente attivi** Ruolo esteso della chimica in tutte le fasi che spaziano dall'idea concettuale iniziale, alla progettazione razionale, alla sintesi e all'ottimizzazione strutturale di una molecola farmacologicamente attiva.

**Competenze specifiche :**

Comprendere i concetti di Biologia Strutturale ed Enzimologia e progettazione razionale, sintesi e ottimizzazione strutturale di una molecola farmacologicamente attiva.

**UE3 CHIMICA MEDICINALE (6 ECTS)**  
**Coordinatori: L. BELVISI**

**Titolo:** Chimica medicinale

**Coordinatori didattici :** L. Belvisi

**Programma :**

Principali fasi dell'azione del farmaco. Farmacocinetica: Assorbimento, distribuzione, metabolismo ed escrezione di farmaci. Farmacodinamica: bersagli molecolari dei farmaci e il concetto di recettore. Principali fasi del processo di scoperta e sviluppo del farmaco. Identificazione LEAD.

**Competenze specifiche :**

Conoscenza sulle principali fasi dell'azione del farmaco

**UE4 SIMULAZIONE, MODELLAZIONE E BIOMOLECOLE (6 ECTS)**  
**Coordinatore: S. PIERACCINI**

**Titolo:** Simulazione, modellazione e biomolecole

**Coordinatore didattico :** S. Pieraccini

**Programma :**

Principi della meccanica molecolare. Il concetto di tipo di atomo. Forma funzionale dei campi di forza. Dinamiche molecolari. Integrazione delle equazioni newton. Condizioni limite periodiche. Calcolo delle condizioni non vincolate. Impostazione di una simulazione MD. Il problema del campionamento. Applicazione al problema del ripiegamento delle proteine

**Competenze specifiche :**

Principi di apprendimento della modellazione molecolare per biomolecole, dinamica molecolare e simulazione di campionamento.

**UE5 MOLECOLE BIOATTIVE (6 ECTS)**  
**Coordinatore: L. BELVISI**

**EC 501 Metodi sintetici in biotecnologia (6 ECTS) (obbligatorio per il doppio diploma)**

**Coordinatore: L. BEVISI**

**Oppure**

**Bioinformatica e lingua (6 ECTS) (se si tratta di un diploma francese)**