

Metodi computazionali in chimica farmaceutica

Il corso si propone di fornire le conoscenze di base sui metodi computazionali comunemente utilizzati per effettuare simulazioni e previsioni di fenomeni correlati alla sfera farmaceutica. Gli studenti apprenderanno e utilizzeranno la meccanica e dinamica molecolare per simulare le interazioni chimiche e la loro evoluzione; il docking per simulare il binding farmaco-target; i modelli farmacoforici per guidare il drug design; QSAR e QSPR per la predizione di dati incogniti.

SSD: CHIM08

CFU: 3 di cui 2 CFU lezioni e 1 CFU laboratorio

Prova finale: Lo studente dovrà preparare e discutere una relazione su uno studio svolto usando le metodologie apprese durante il corso.

Propedeuticità consigliate: Biochimica, Chimica Farmaceutica I, Chimica Farmaceutica II, Chimica Organica