

Descrizione sintetica del seminario

Data:

06-April-2018

Speaker:

Alessandro Di Domizio

Nel seminario verrà affrontato il problema delle interazioni off-target dei farmaci, le quali sono in gran parte responsabili sia degli elevatissimi costi associati allo sviluppo di nuovi farmaci, sia degli effetti collaterali dei farmaci stessi.

Per riuscire ad individuare le proteine off-target di una particolare molecola, ad esempio di un farmaco, è stato sviluppato il software innovativo SPILLO-PBSS, con cui è possibile analizzare l'intero proteoma strutturale umano attualmente disponibile e individuare le proteine a cui è più probabile che si leghi la molecola considerata.

Verranno descritti i numerosi vantaggi che possono derivare dall'utilizzo di tale tecnologia in vari ambiti, tra cui il processo di drug discovery and development (ad es. per lo sviluppo di farmaci più sicuri) e l'ambito medico, con particolare riferimento alla possibilità di studiare terapie che tengano conto delle caratteristiche individuali del paziente (medicina personalizzata).

[1] Di Domizio A. et al. 'SPILLO-PBSS: Detecting hidden binding sites within protein 3D-structures through a flexible structure-based approach', *Journal of Computational Chemistry*, 35(27): 2005-2017, 2014.