



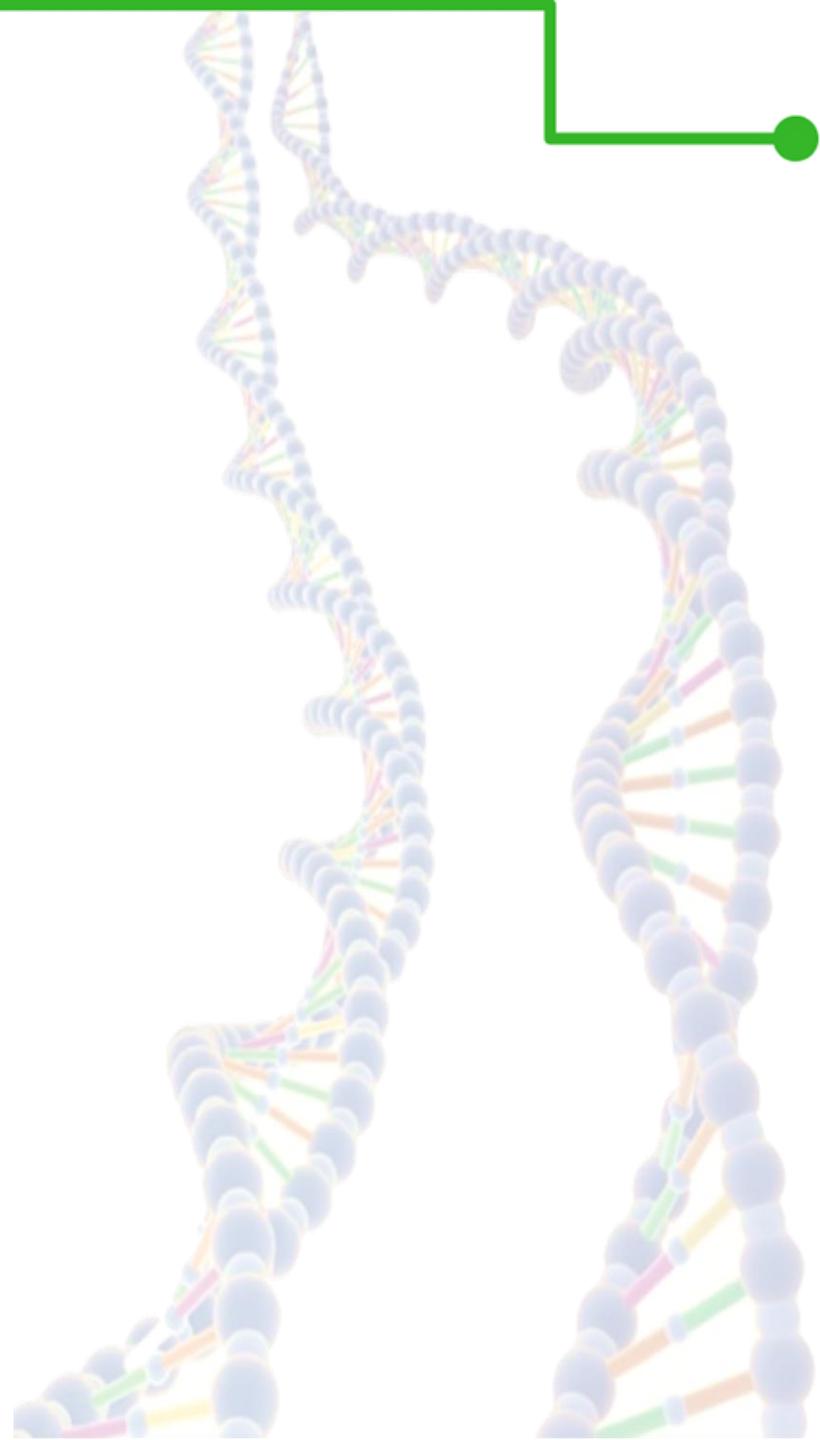
# Modellistica Molecolare di proprietà dinamiche e interazioni di proteine

**Prof. Laura Bonati**

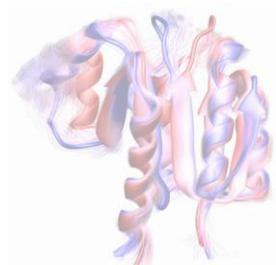
Dott. Stefano Motta, Dott. Lara Callea

**Laboratorio di Modellistica Molecolare**

DISAT, Ed. U1 – [laura.bonati@unimib.it](mailto:laura.bonati@unimib.it)



## **AMBITO di RICERCA**

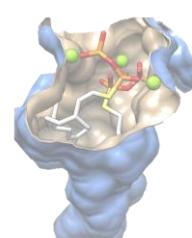
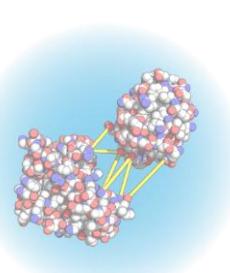


**Studio delle proprietà dinamiche di proteine**

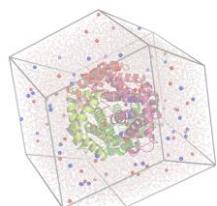
**Studio delle interazioni:**

**Proteina - Proteina**

**Ligando - Proteina**

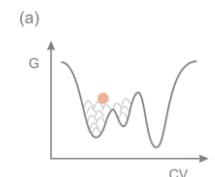


## **METODI COMPUTAZIONALI**



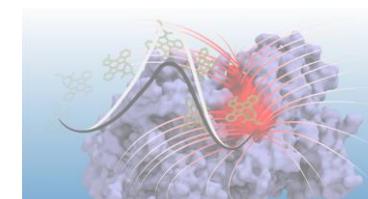
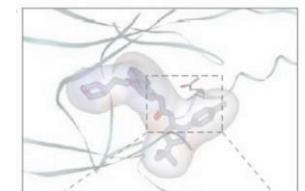
**Dinamica Molecolare (MD)**

**Tecniche di dinamica avanzata per studi di meccanismi complessi**



**Docking Molecolare**

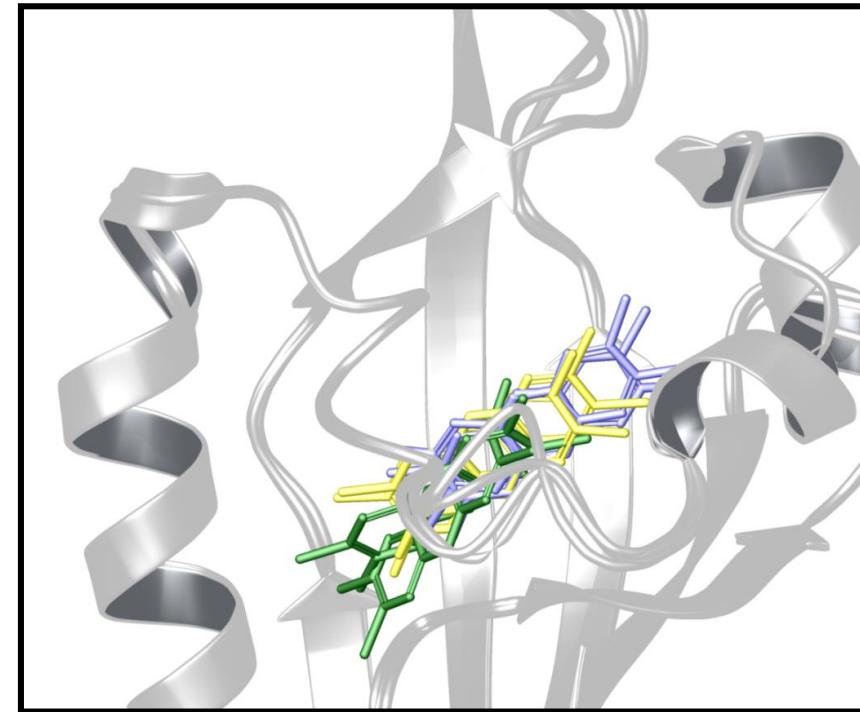
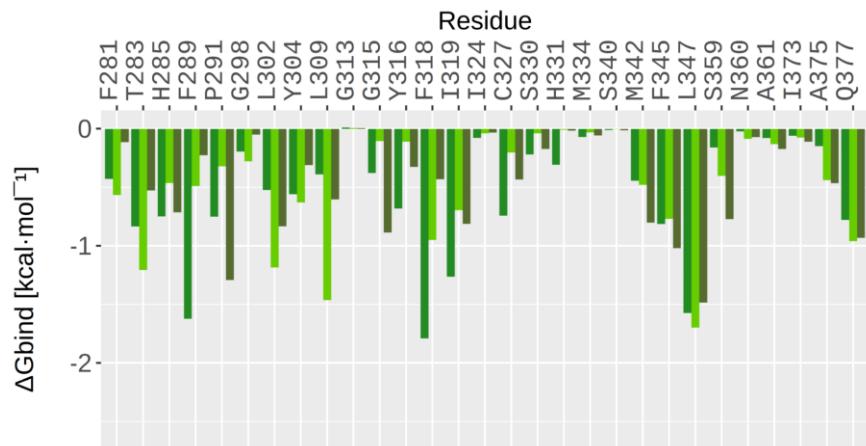
**Binding di ligandi con metodi MD**



# Razionalizzazione e predizione della tossicità di contaminanti ambientali

L'Aryl hydrocarbon Receptor è una proteina in grado di legare un elevato numero di molecole organiche.

Principalmente noto per gli effetti tossici che produce in seguito al binding di alcuni noti contaminanti ambientali come alcune diossine

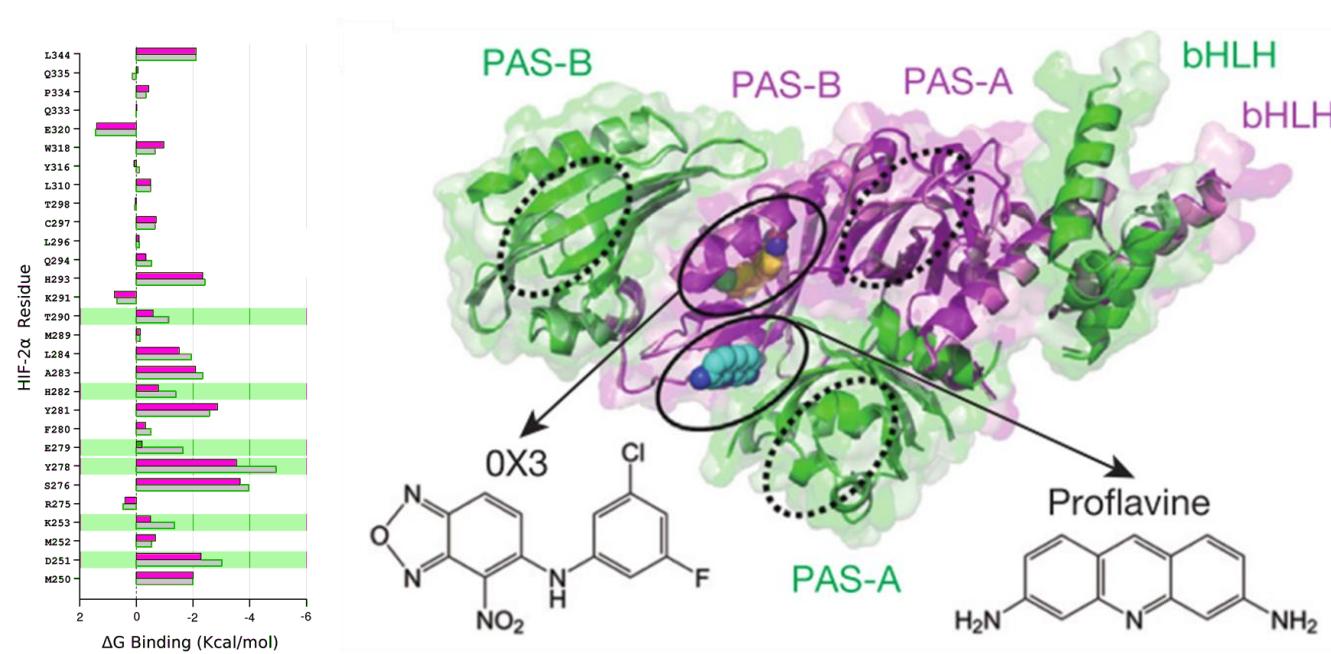
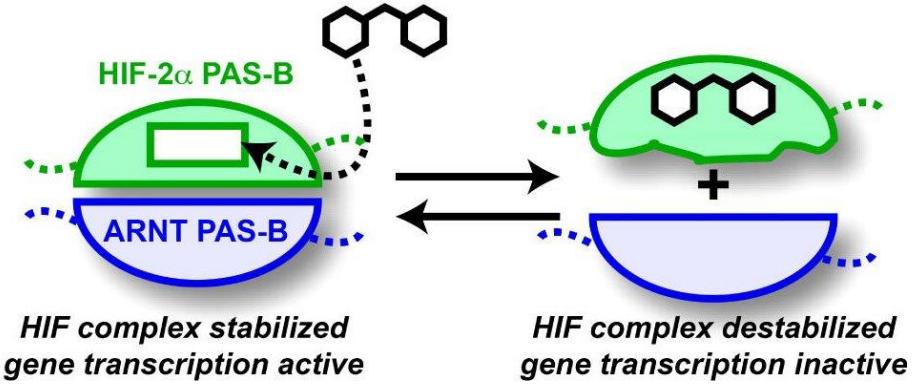


Predizione mediante uso del docking molecolare di geometrie e  $\Delta G_{\text{binding}}$  di contaminanti organici con l'Aryl hydrocarbon Receptor di diverse specie e con i suoi mutanti

# Comprendere del meccanismo di inibizione di HIF-2 $\alpha$

L'Hypoxia inducible Factor è un fattore di trascrizione che media la risposta all'ipossia e quindi coinvolto nella crescita tumorale.

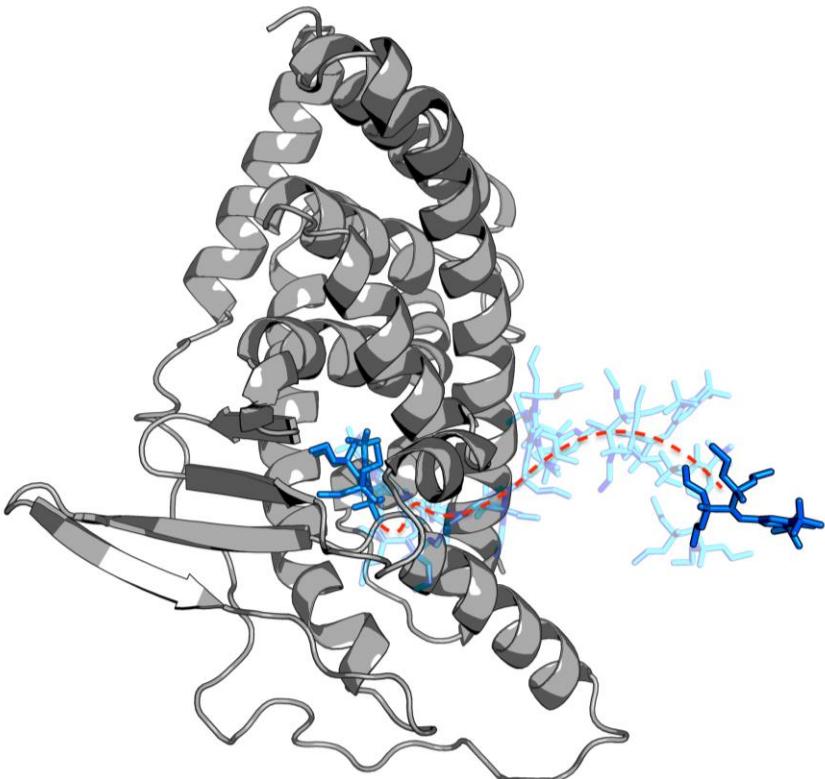
La sua inibizione è una valida strategia antitumorale.



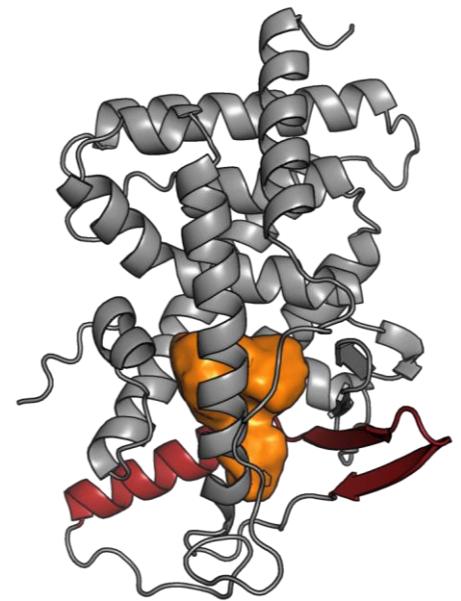
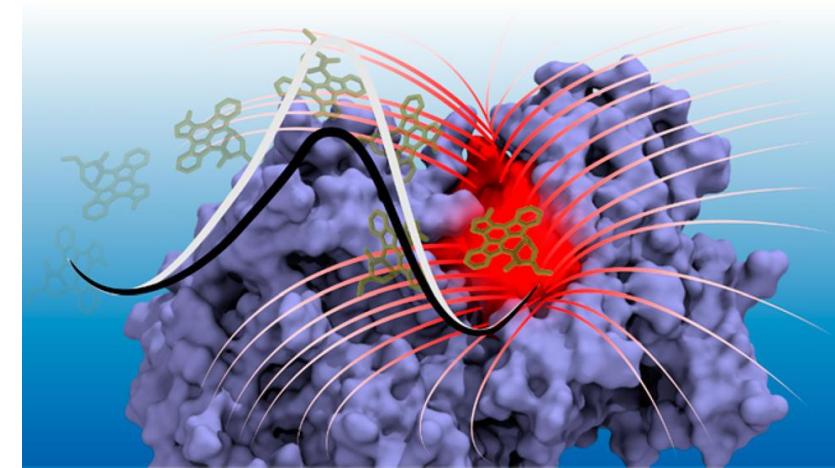
È stata studiata la dinamica del dimero con la proteina partner ARNT in presenza ed assenza di ligandi per studiarne le proprietà dinamiche e comprendere il meccanismo di azione degli inibitori.

## Studio del processo di binding di ligandi al recettore PXR

Pregnane X Receptor è un recettore nucleare attivato dal binding di ligandi. E' un caso complesso perché possiede una cavità ampia e in grado di dare interazioni diverse con diversi ligandi.



E' stato studiato il processo di binding  
mediante dinamica molecolare  
accelerata.





## **Competenze Acquisibili**

- ✓ Utilizzo di metodi di modellistica molecolare
- ✓ Trattamento e analisi di dati
- ✓ Utilizzo di programmi di grafica molecolare
- ✓ Consultazione di database on line
- ✓ Utilizzo del sistema operativo Linux

## **Opportunità**

- ✓ Partecipazione a un progetto di ricerca
- ✓ Interazioni con ricercatori stranieri con competenze multidisciplinari