

Modellistica Molecolare di proprietà dinamiche e interazioni di proteine

Prof. Laura Bonati

Dott. Stefano Motta, Dott. Lara Callea

Laboratorio di Modellistica Molecolare

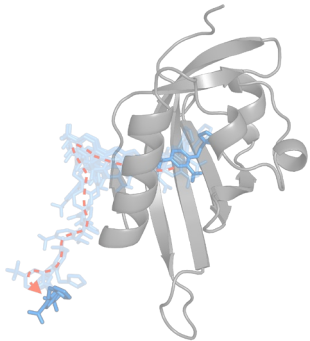
DISAT, Ed. U1, PT - T009

laura.bonati@unimib.it



AMBITO di RICERCA

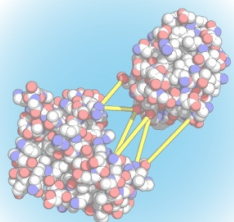
Studio dei meccanismi di azione di proteine a livello molecolare:



Interazioni ligando:proteina

Interazioni proteina:proteina

Dinamica delle proteine nei meccanismi di trasmissione del segnale



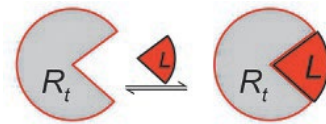
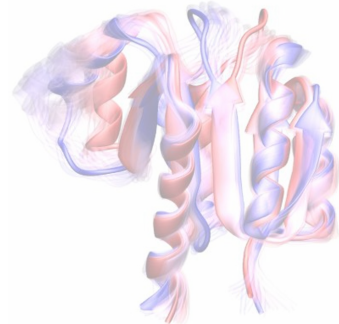
METODI COMPUTAZIONALI

Meccanica Molecolare

Dinamica Molecolare (MD)

Tecniche di dinamica avanzata

Docking Molecolare

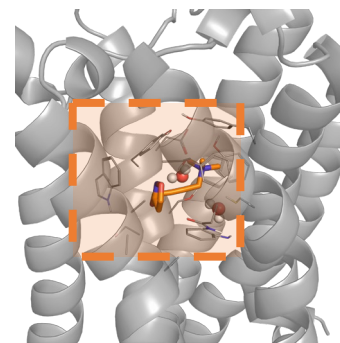


Meccanica Quantistica

Caratterizzazione

delle interazioni mediante

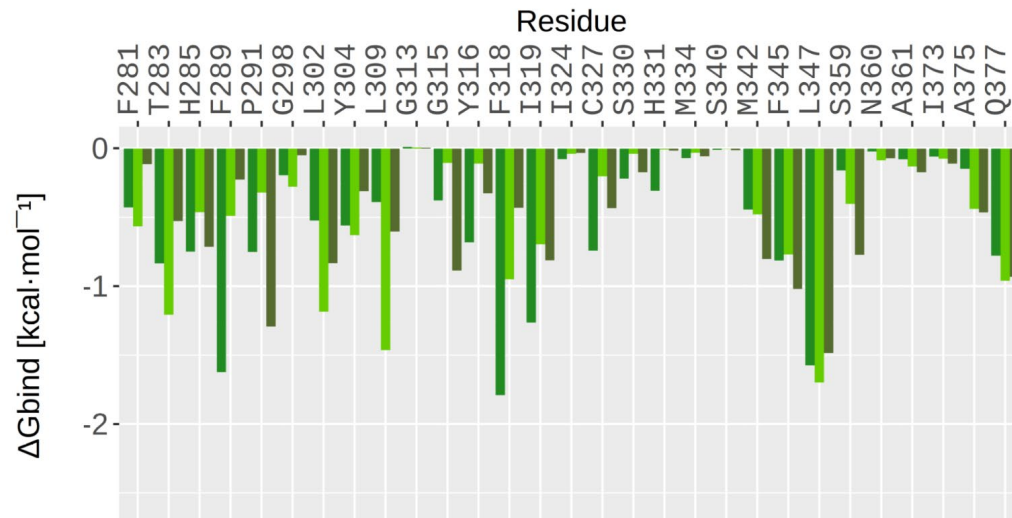
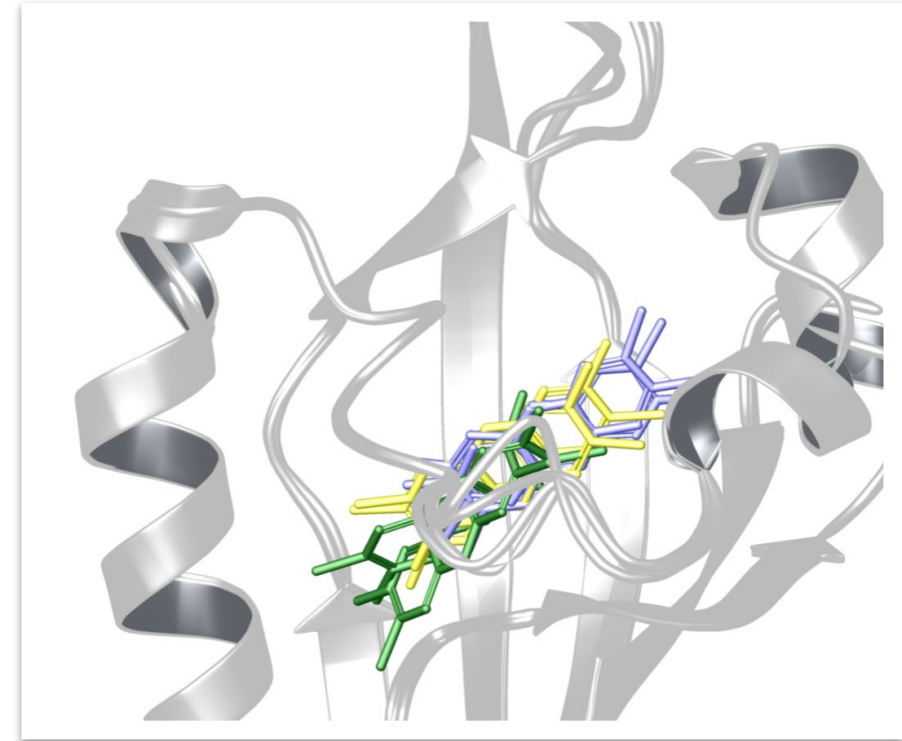
calcoli QM/MM



Modellistica dell'attivazione del Aryl Hydrocarbon Receptor

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

Noto come sensore di contaminanti ambientali (effetti di tossicità) e come target di farmaci per diverse patologie

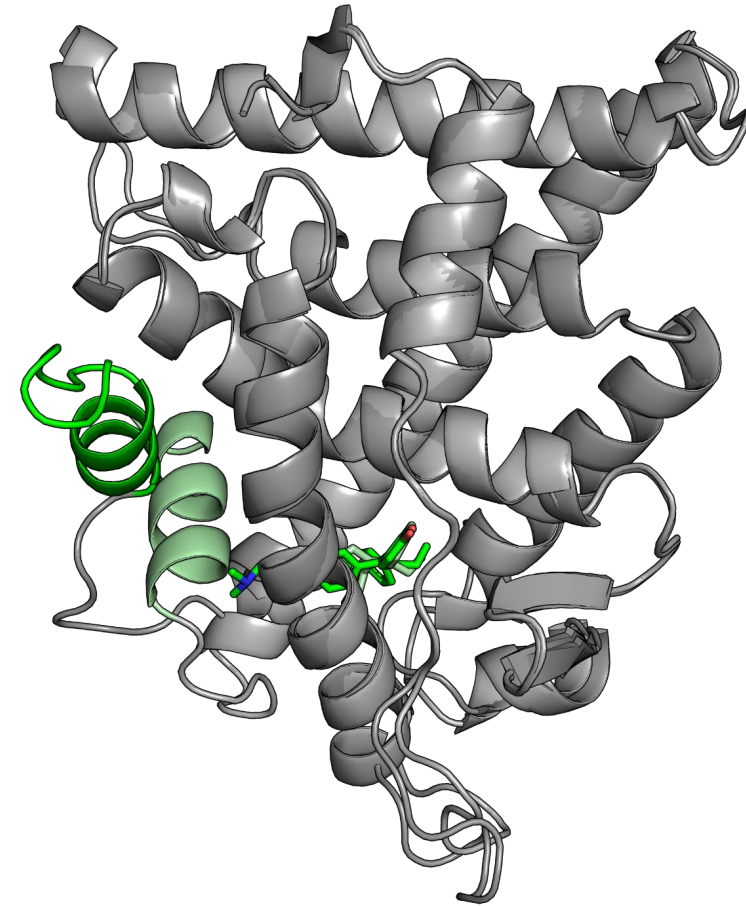
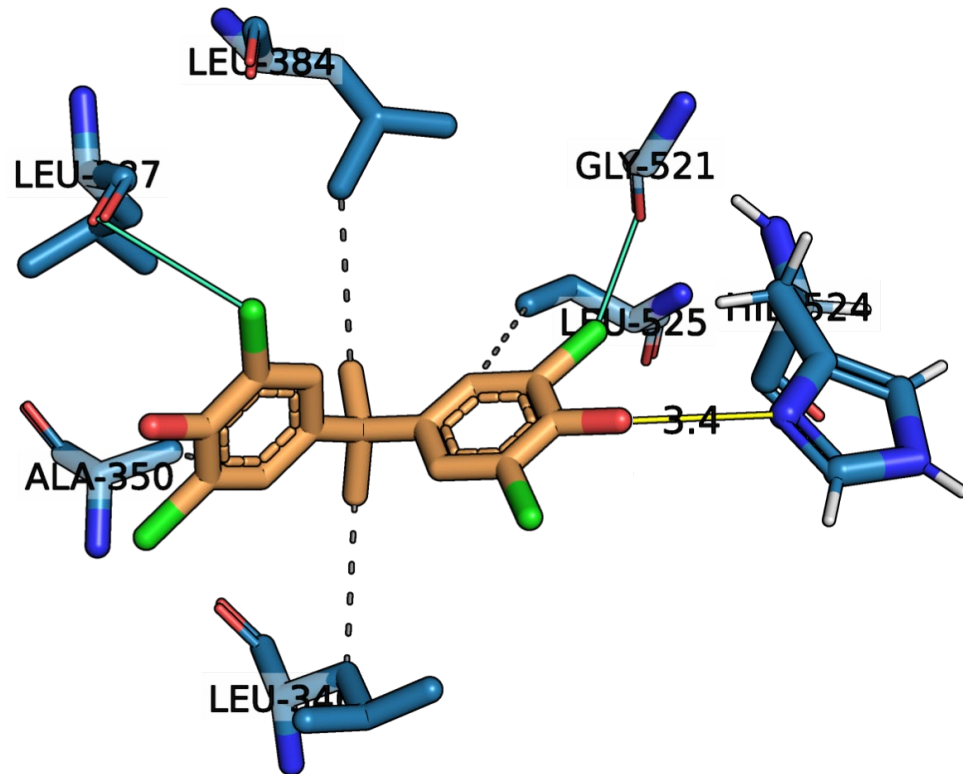


Vengono predette le geometrie e le energie di binding di molecole di interesse tossicologico e farmacologico mediante docking molecolare

Studio delle interazioni di agonisti/antagonisti con l'Estrogen Receptor

L'estrogen receptor è coinvolto nel meccanismo di attivazione degli estrogeni

È anche recettore di farmaci che agiscono come agonisti/antagonisti degli ormoni e di contaminanti ambientali (distruttori endocrini)

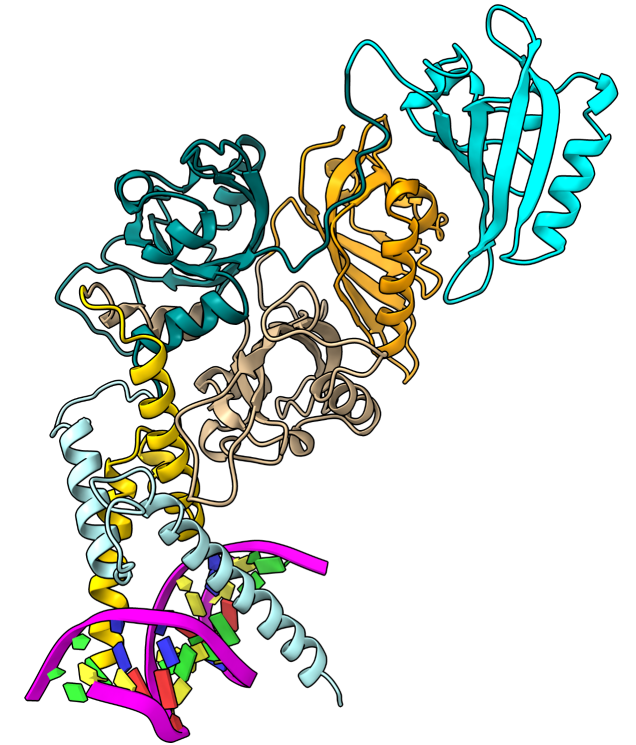
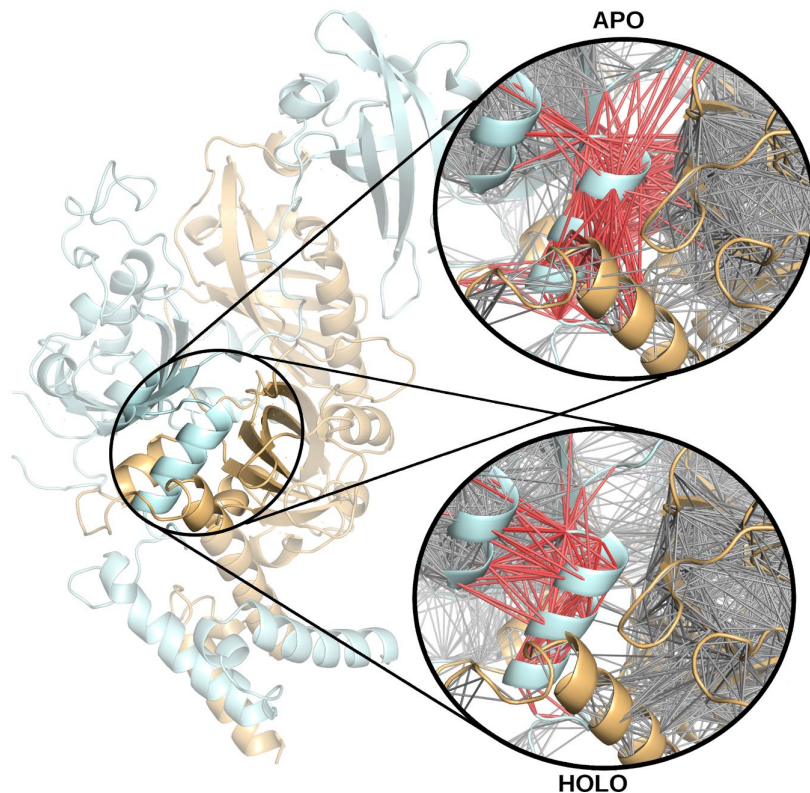


Vengono analizzate le interazioni ligando-proteina mediante metodi classici (dinamica molecolare e docking) e approcci ibridi (QM/MM).

Comprensione del meccanismo di attivazione di proteine bHLH-PAS

Le proteine bHLH-PAS sono fattori trascrizionali coinvolti in numerosi meccanismi di ricezione di segnali cellulari implicati in diverse patologie.

I meccanismi coinvolgono la formazione di complessi proteina:proteina.



Viene studiata la dinamica dei dimeri per comprendere le interazioni proteina:proteina e la trasmissione a lungo raggio degli effetti di attivatori/inibitori.

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

Glide, Gromacs, Amber, Gaussian, CP2K

Xmgrace, R, Machine Learning

Pymol, Maestro, VMD

PDB, Uniprot, BindingDB

