



# Modellistica Molecolare di proprietà dinamiche e interazioni di proteine

**Prof. Laura Bonati**

**Dott. Stefano Motta, Dott. Lara Callea**

**Laboratorio di Modellistica Molecolare**

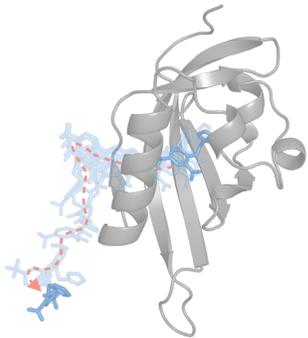
**DISAT, Ed. U1, PT - T009**

**[laura.bonati@unimib.it](mailto:laura.bonati@unimib.it)**



## ***AMBITO di RICERCA***

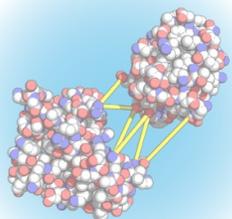
**Studio dei meccanismi di azione di proteine a livello molecolare:**



**Interazioni ligando:proteina**

**Interazioni proteina:proteina**

**Dinamica delle proteine nei meccanismi di trasmissione del segnale**



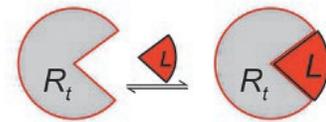
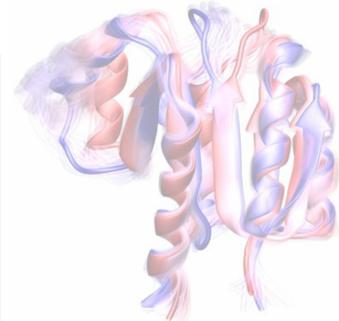
## ***METODI COMPUTAZIONALI***

**Meccanica Molecolare**

**Dinamica Molecolare (MD)**

**Tecniche di dinamica avanzata**

**Docking Molecolare**

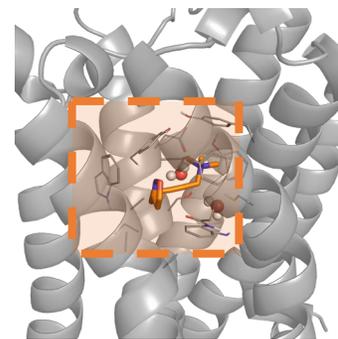


**Meccanica Quantistica**

**Caratterizzazione**

**delle interazioni mediante**

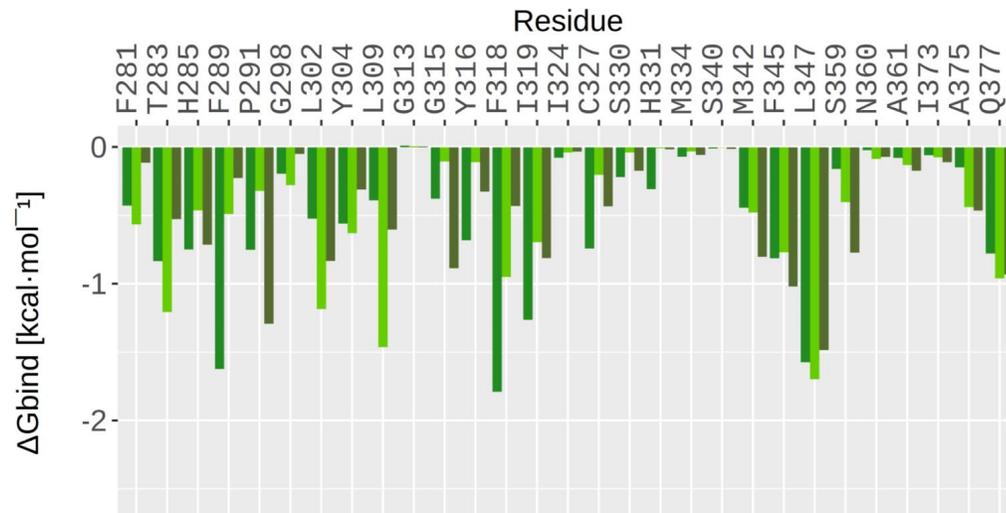
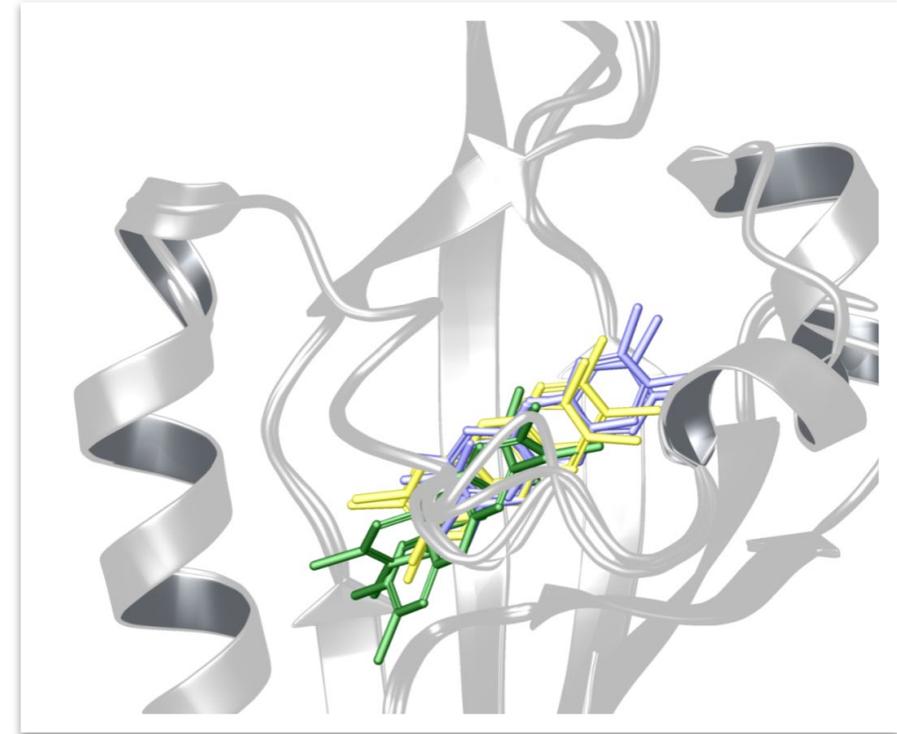
**calcoli QM/MM**



# 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

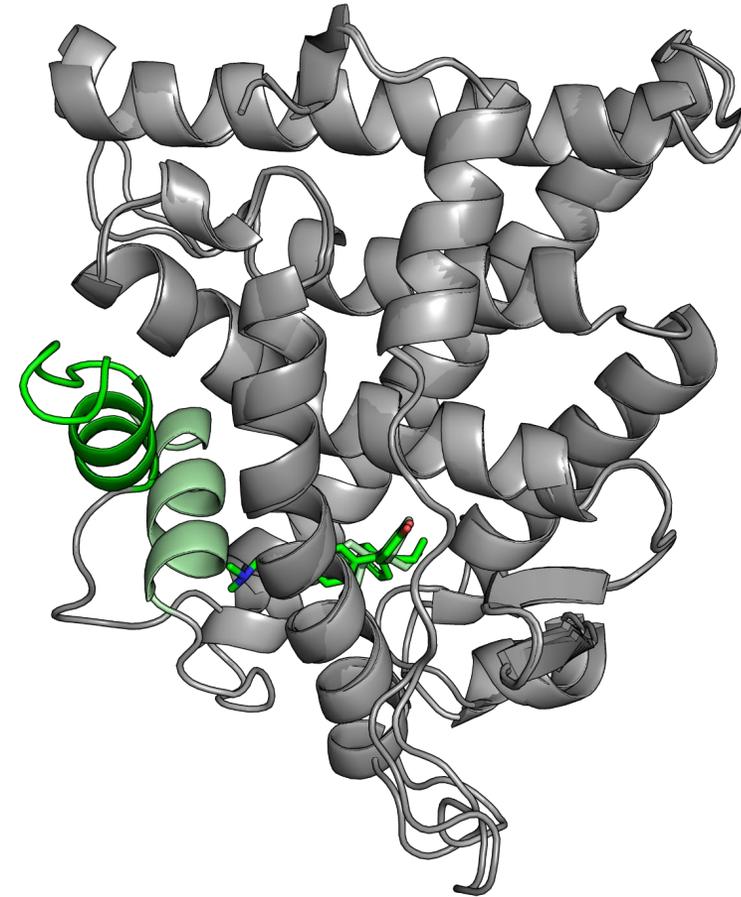
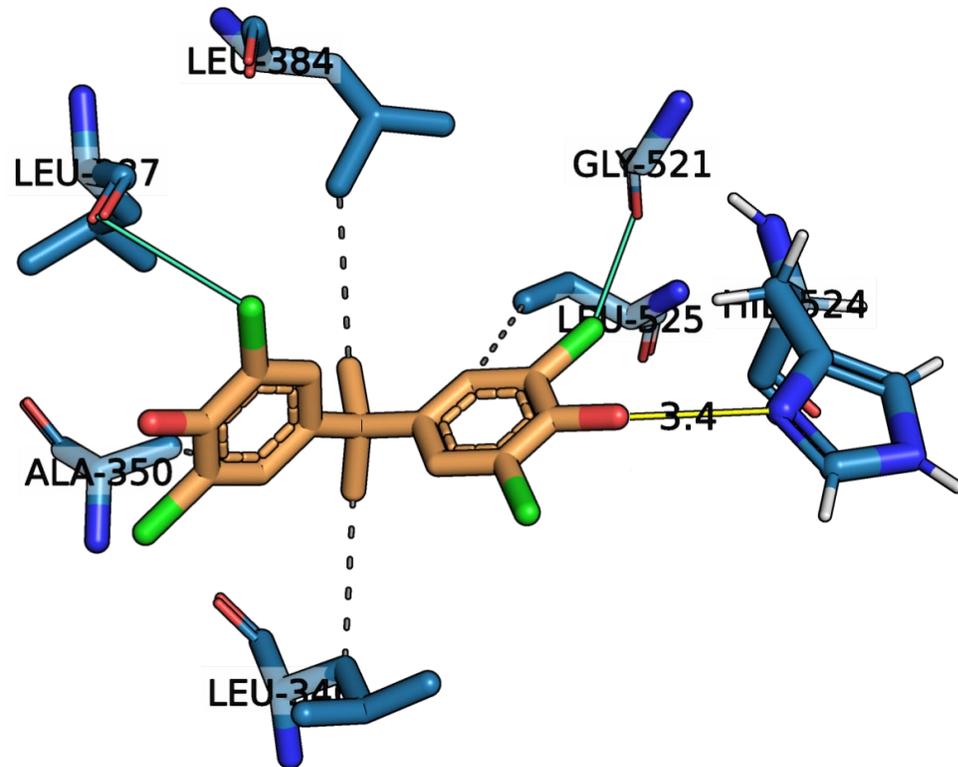


Vengono predette le geometrie e le energie di binding di molecole di interesse tossicologico e farmacologico mediante docking molecolare

# 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)

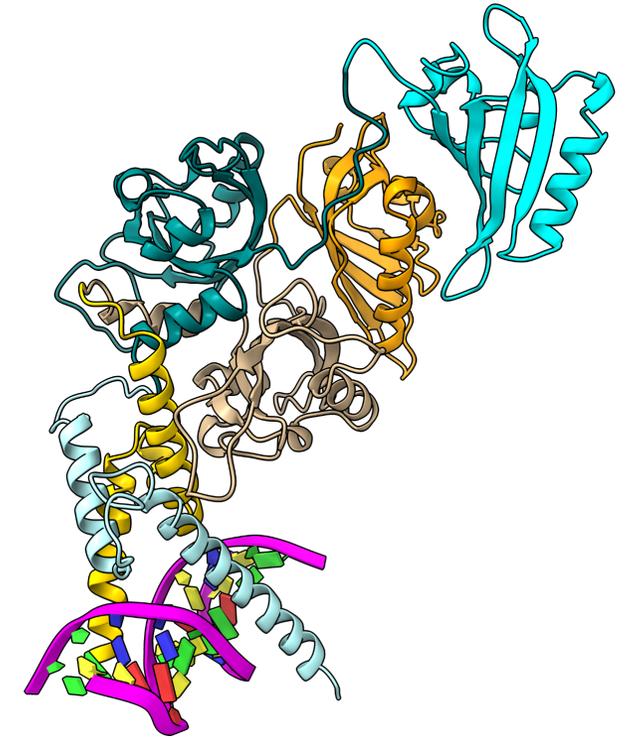
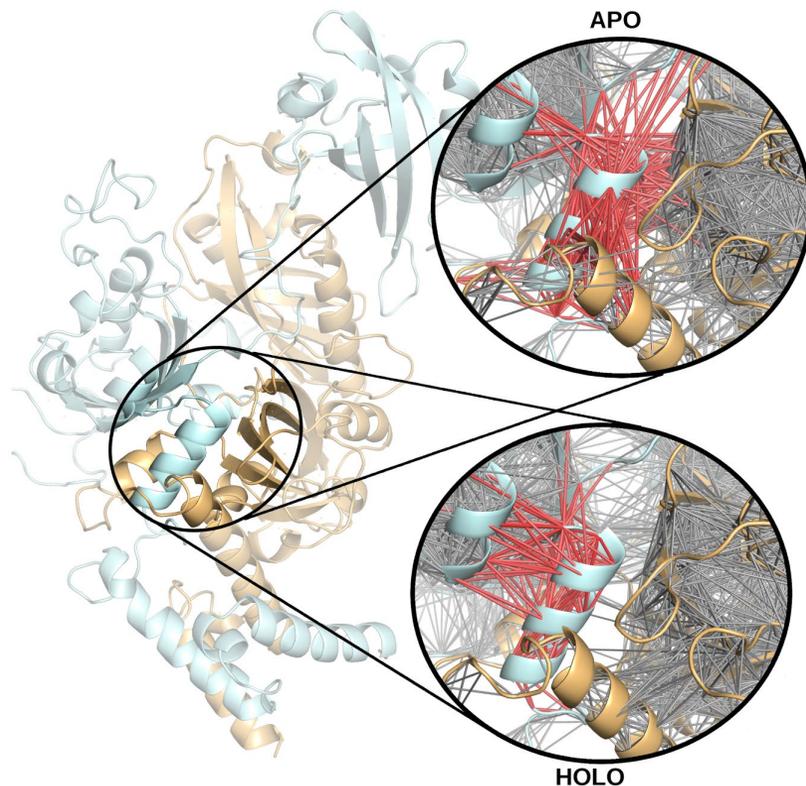


Vengono analizzate le interazioni ligando-proteina mediante metodi classici (dinamica molecolare e docking) e approcci ibridi (QM/MM).

# 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

