



Milestone 65: Piattaforma integrata per l'identificazione e la caratterizzazione di nuove molecole

Giovanni Bottegoni

Computer-assisted Molecular Design

Università degli Studi di Urbino Carlo Bo

University of Birmingham



MISSIONE 4
ISTRUZIONE
RICERCA



Finanziato
dall'Unione europea
NextGenerationEU



Ministero
dell'Università
e della Ricerca

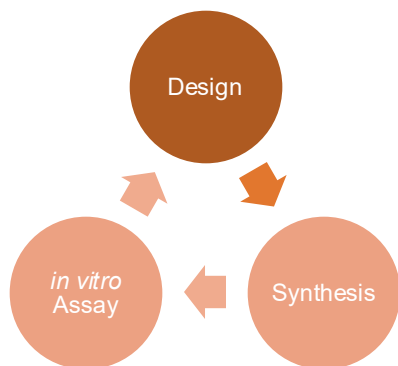


Italiadomani
PIANO NAZIONALE
DI RIPRESA E RESILIENZA



1506
UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI URBINO
CARLO BO

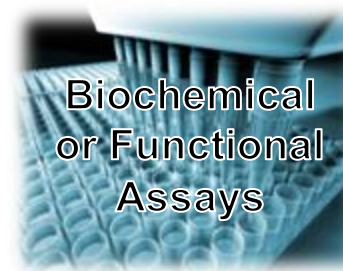
M65 - Piattaforma integrata per l'identificazione e la caratterizzazione di nuove molecole



- Ultra Large Commercial Libraries (10^9)
- DL-generated Compounds (10^7)
- Combinatorial SAR Explorations (10^4)



Compound Prioritization by
Computational Means
(10^2)



Biochemical
or Functional
Assays



Surface
Plasmon
Resonance
(SPR)



MicroScale
Thermophoresis
(MST)



Circular
Dichroism
(CD)



Nuclear
Magnetic
Resonance
(NMR)

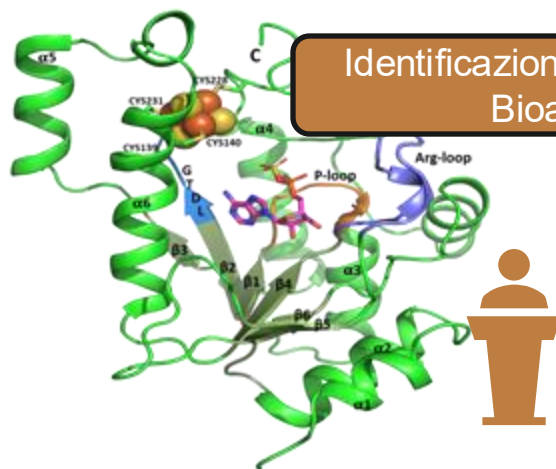
Biophysical Assays

Task 1.1

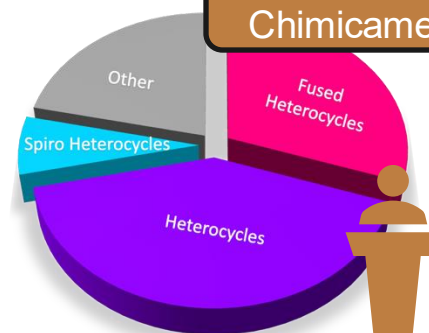
TASK1.1 - Approntamento e validazione della piattaforma

Infrastruttura per il calcolo ad alte prestazioni

- ❑ 2 AMD Epyc 64-Core 7713 2.00 GHz 256 MB
- ❑ 4 GPU NVIDIA RTX A6000 48 GB
- ❑ Quasi 40 TB di spazio per l'immagazzinamento di dati

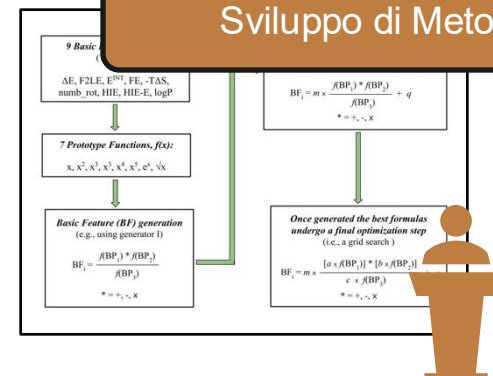


Identificazione di Molecole
Bioattive



Libreria Proprietaria
Chimicamente Diversificata

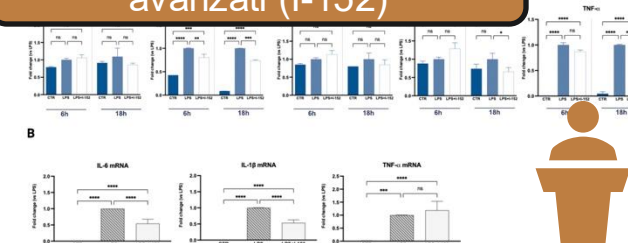
Sviluppo di Metodi



Altri progetti:

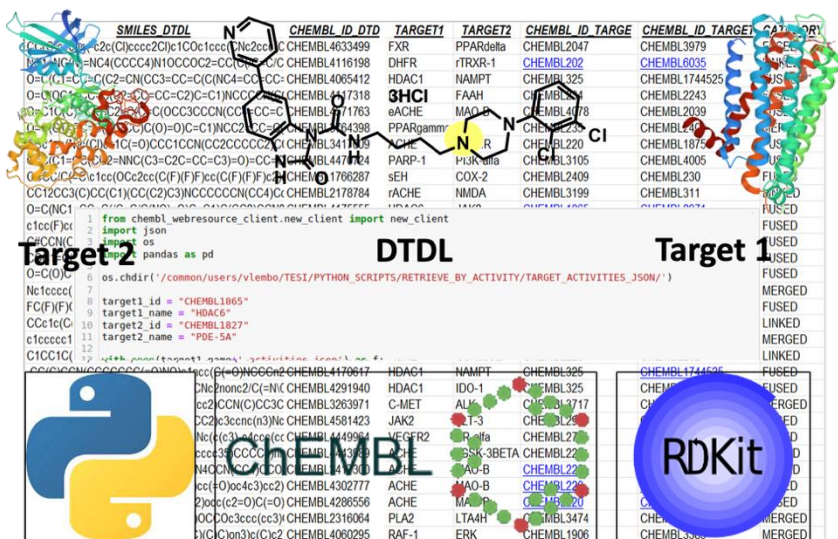
- ML per generazione di composti
- ML per studi omici

Ottimizzazione di candidati avanzati (I-152)



Task 1.2

TASK1.2 - Sviluppo, validazione, applicazione di Metodi per la Polifarmacologia Razionale



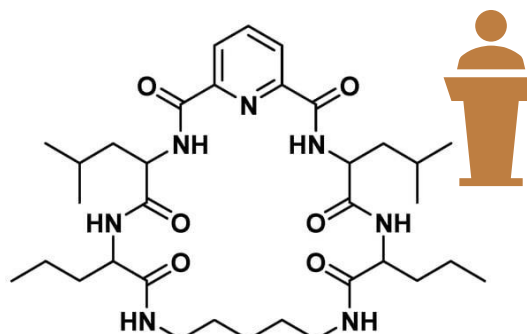
Target 2

DTDL

Target 1

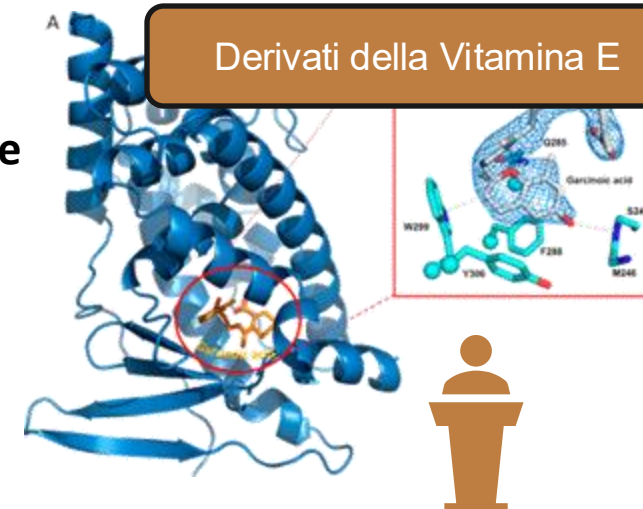
RDKit

Lembo & Bottegoni, JMC 2024



Sintesi Complesse

Derivati della Vitamina E

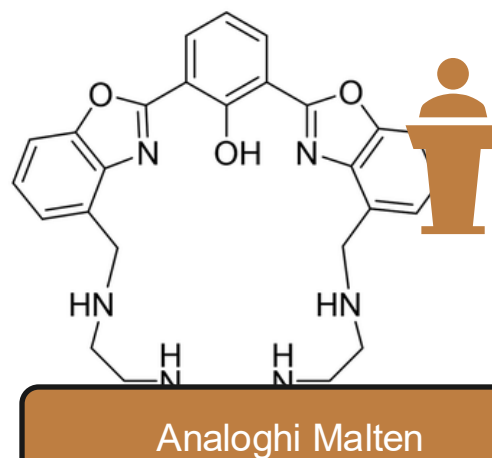
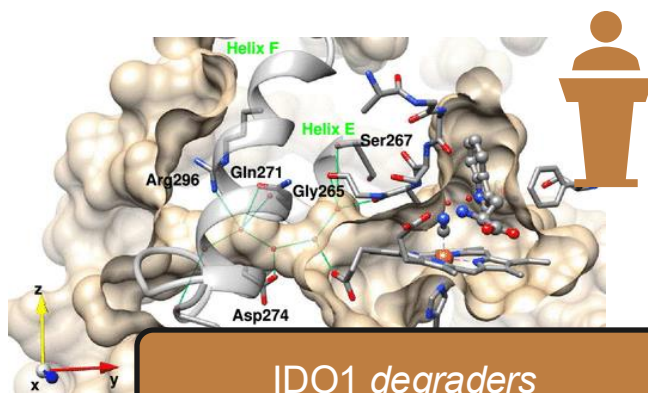


Altri progetti in ambito
Polifarmacologico:

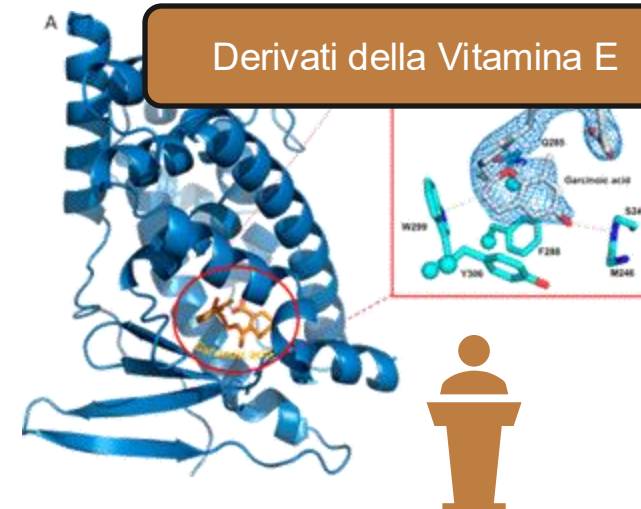
- Derivati della Melatonina
- Dipendenza da Nicotina

Task 1.3

TASK1.1 - Bersagli innovativi per lo sviluppo di molecole ad attività antitumorale



Derivati della Vitamina E



Altri progetti in ambito Antitumorale:

- Composti ad attività BCNT
- Inibitori di ERO-1
- Studi su linee tumorali in 2D e 3D



**Finanziato
dall'Unione europea**
NextGenerationEU



**Ministero
dell'Università
e della Ricerca**



Italiadomani
PIANO NAZIONALE
DI RIPRESA E RESILIENZA

Grazie per l'attenzione