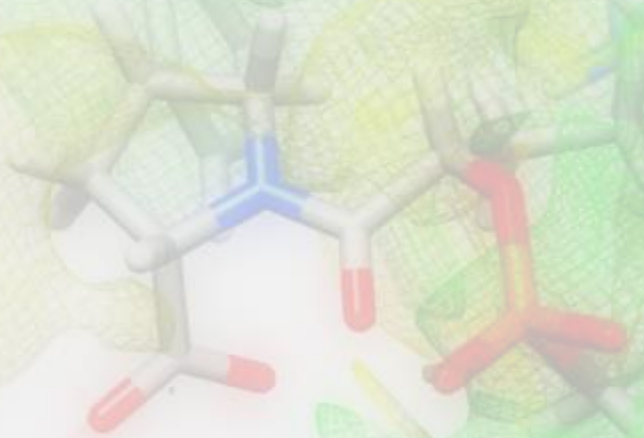
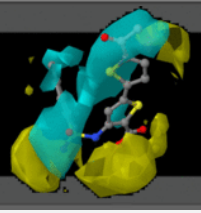
Pharmacophoric Model:LigandScout

SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

COS'È UN FARMACOFORO?

Farmacoforo è l'insieme degli elementi strutturali o funzionali comuni ad un set di molecole caratterizzate da attività biologica verso un target biologico





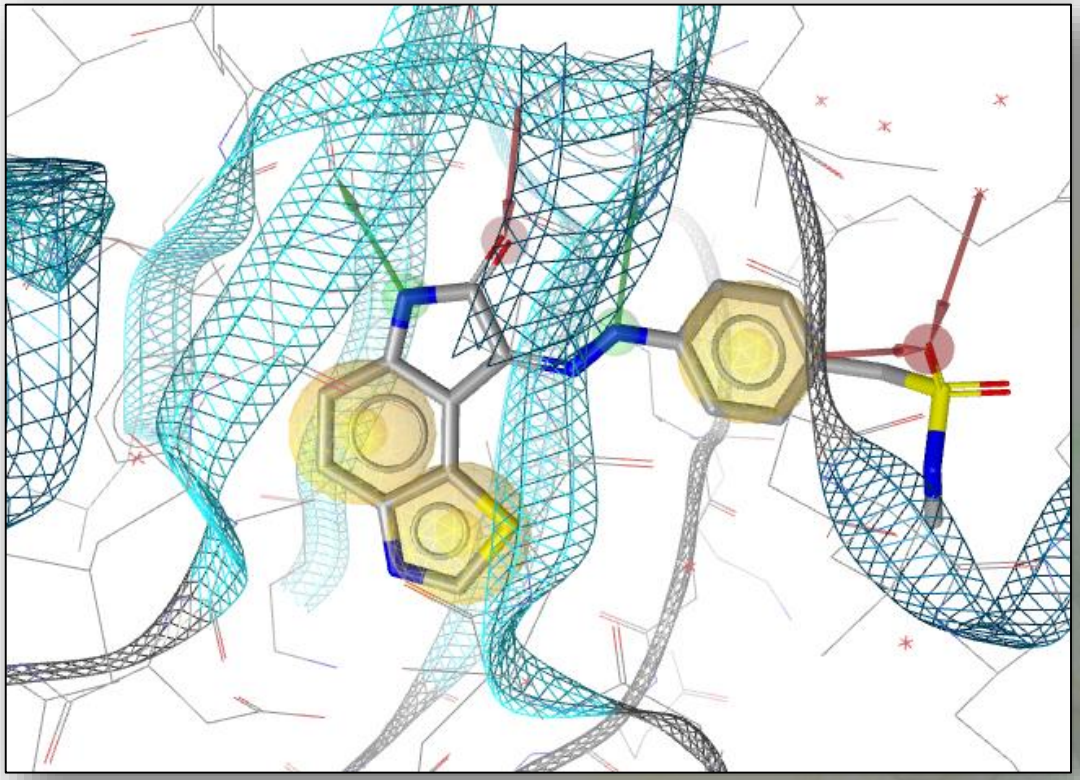
COS'È UN FARMACOFORO?

Farmacoforo è l'insieme degli elementi strutturali o funzionali comuni ad un set di molecole caratterizzate da attività biologica verso un target biologico

1998
Camille Wermuth

Farmacoforo è l'insieme delle features steriche ed elettrostatiche necessarie a garantire un'interazione intra-molecolare ligando-recettore tale da scatenare una risposta biologica.

COS'È UN FARMACOFORO?



Farmacoforo Structure-based

FARMACOFORO STRUCTURE-BASED

Download complesso

- Verifica correttezza del dato

Analisi punti farmacoforici

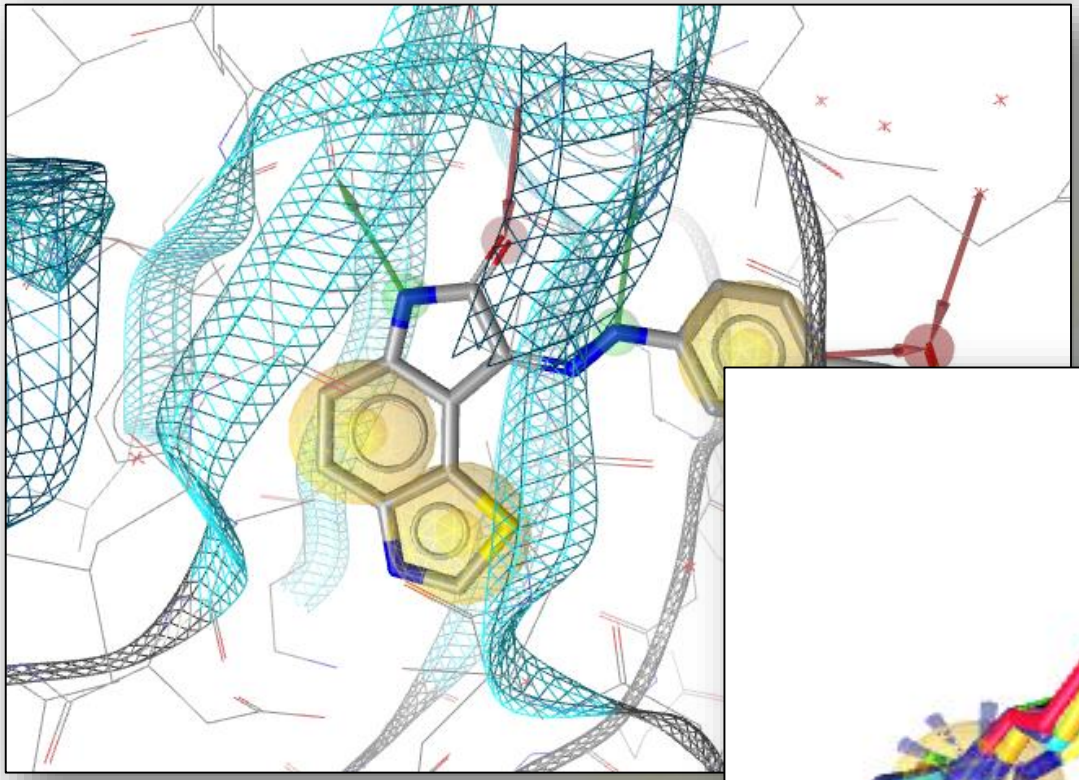
- Gruppi potenziali
- Interazioni potenziali

Posizionamento delle features

- Verifica dei requisiti geometrici

Inserimento delle sfere di esclusioni

COS'È UN FARMACOFORO?



Farmacoforo Structure-based

Farmacoforo Ligand-based

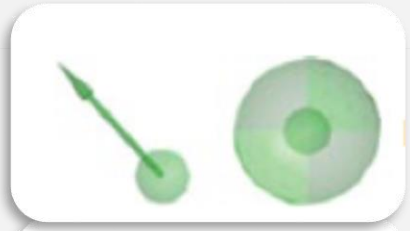
FARMACOFORO LIGAD-BASED

- Ottenimento del data set
- Analisi conformazionale
- Creazione modelli farmacoforici
- Allineamento dei modelli farmacoforici
- Ottenimento dei modelli ottimali

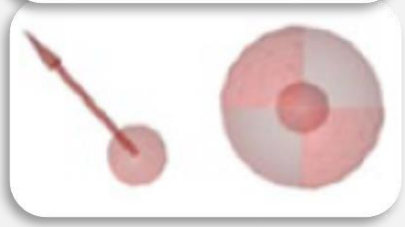
WORKFLOW

- Creazione Modello
  - Structure-Based
  - Ligand-based
- Validazione del modello
  - Test Set
- Applicazione del modello
  - Libreria commerciale

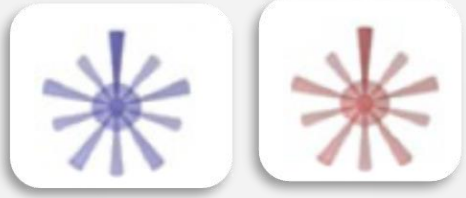
PUNTI FARMACOFORICI



Donatore Legami idrogeno



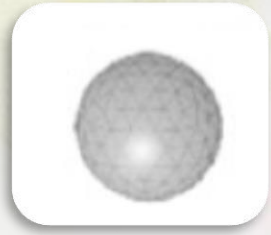
Accettore Legami idrogeno



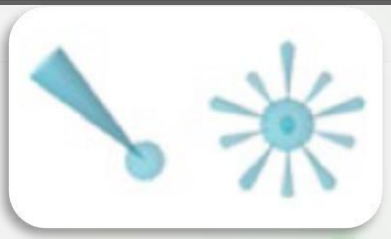
Area ionizzabile

Interazioni idrofobiche

Anelli aromatici



Excluded Volume



Magnesium Binding Location

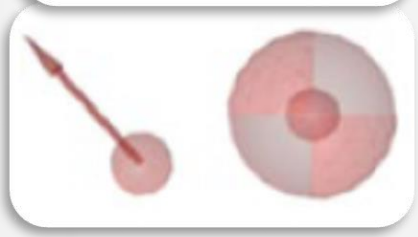
Zinc Binding Location

Iron Binding Location

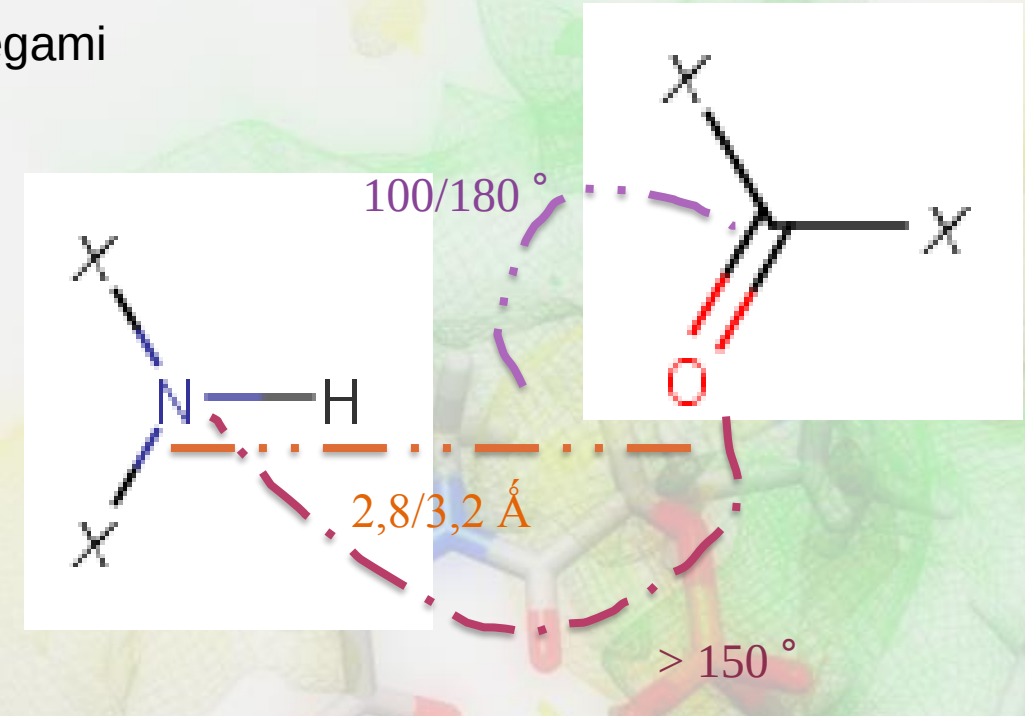
Manganese Binding Location

LEGAMI IDROGENO

Donatore Legami idrogeno



Accettore Legami idrogeno



INTERAZIONI SISTEMI Π

Anelli aromatici