

CHI SIAMO

LABORATORIO DI MODELLISTICA MOLECOLARE



<http://www.farmacia.unina.it>



IL LABORATORIO ED IL KNOW-HOW

Il laboratorio di modellistica molecolare (LMM) è specializzato nello sviluppo e nell'applicazione, in ambito biofarmaceutico, di metodologie avanzate di chemoinformatica, bioinformatica e chimica teorica e computazionale, supportate da piattaforme di intelligenza artificiale.

Nel LMM lavorano ricercatori fra i primi in Italia ad occuparsi di chimica computazionale così come giovani ricercatori e dottorandi che hanno contribuito a raggiungere e a mantenere un eccellente livello di produzione scientifica. Pertanto, esso rappresenta un importante punto di riferimento per coloro che intendono approcciarsi al mondo del Drug Discovery e della Computational Biology.

Per lo sviluppo e il potenziamento dell'attività di ricerca del LMM è stato fondamentale l'acquisto di un cluster di computer ad alta prestazione (HPC) dotato di un totale di 624 cores di calcolo, e 2 GPU NVIDIA® Tesla® V100, integrato con un ampio sistema di storage per l'archiviazione dei dati e collegato a più di 30 postazioni di lavoro indipendenti.

Il LMM comprende diversi gruppi di ricerca, ciascuno impegnato su tematiche specifiche nell'ambito dello sviluppo razionale di nuovi potenziali agenti terapeutici/diagnostici.

CONTATTI:

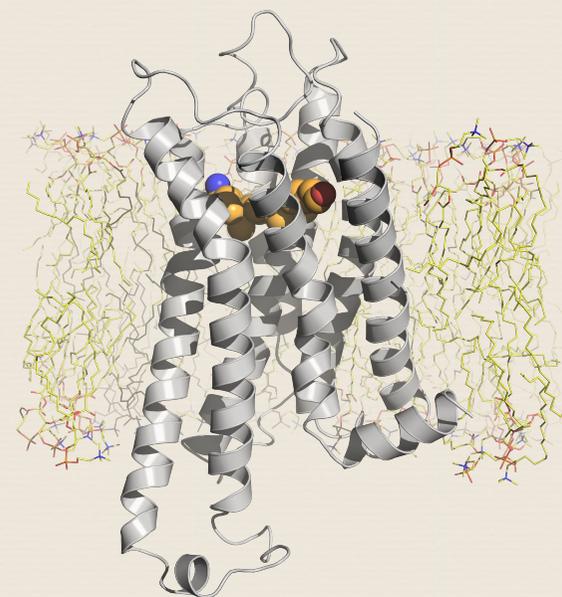
Coordinatore Attività:

Prof. Luciana Marinelli, lmari@unina.it

Responsabile Scientifico:

Prof. Antonio Lavecchia, antonio.lavecchia@unina.it

LABORATORIO DI MODELLISTICA MOLECOLARE



La nostra attività di ricerca ha lo scopo principale di supportare il processo di *Drug Discovery*, consentendo di individuare nuovi composti come potenziali *lead* e di caratterizzarne a livello molecolare il meccanismo d'azione e le modalità di interazione con un determinato bersaglio molecolare di interesse terapeutico.



Università di Napoli Federico II
Dipartimento di Farmacia,
Via D. Montesano, 49 - 80131 - Napoli



Laboratorio di Modellistica Molecolare

UNO SGUARDO ALLA NOSTRA ATTIVITÀ

L'attività scientifica del LMM verte principalmente sull'identificazione e sullo sviluppo di potenziali agenti terapeutici e diagnostici attraverso l'integrazione di metodologie computazionali con dati sperimentali.



Organizzazione del Laboratorio e Strumentazioni disponibili

30 Workstation professionali

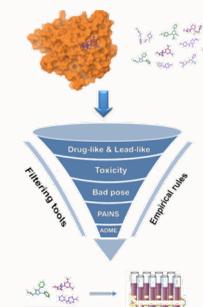
Cluster HPC ibrido CPU/GPU ad alta prestazione

Sistema di storage ad elevata capacità per l'archiviazione dei dati

Software per computazione, analisi dati e visualizzazione molecolare avanzate

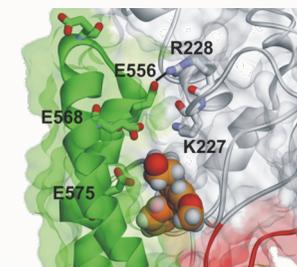
Drug Design & Discovery

Progettazione ed identificazione di composti di potenziale interesse farmaceutico attraverso tecniche di screening virtuale e *de novo* design.



Interazione farmaco-bersaglio biologico

Definizione, a livello atomistico, del meccanismo di azione di molecole farmacologicamente attive attraverso metodologie bioinformatiche, quantomeccaniche e basate sulla meccanica e dinamica molecolare.



Intelligenza Artificiale

Applicazione di algoritmi di machine learning per la predizione della struttura tridimensionale di proteine e acidi nucleici e la modellazione predittiva dell'interazione ligando-recettore.

