

SCHEDA LABORATORIO SCIENTIFICO N.13

TITOLO: CHIMICA FARMACEUTICA COMPUTAZIONALE

Responsabile: SANDRO COSCONATI

RADOR: SANDRO COSCONATI

Gruppi afferenti: DRUG DISCOVERY: PROGETTAZIONE, SINTESI E VEICOLAZIONE

Numero postazioni: 2

Breve descrizione

Nel laboratorio di Chimica Farmaceutica Computazionale vengono sviluppate ed applicate avanzate metodologie teoriche volte ad accelerare il processo di scoperta dei farmaci.

Lista di attrezzature o categorie di attrezzature:

- 1 Workstation Linux Octa-core con due monitor da 28 pollici
- 1 Workstation Linux a 24 cores di calcolo con un monitor da 28 pollici
- 1 Workstation Linux Quad-core con due monitor da 28 pollici

Attività svolte nel laboratorio

Le maggiori attività del laboratorio riguardano l'applicazione di calcoli teorici quali il:

- "Docking" molecolare
- Dinamica molecolare
- "Virtual screening"

Questi calcoli vengono ottenuti l'utilizzo di sistemi computazionali ad alte prestazioni presenti nel laboratorio.

Categorie ISI WEB di riferimento: Chemistry, Medicinal Chemistry, Multidisciplinary Chemistry, Organic

Categorie ERC di riferimento: LS7_3, PE5_18

Settori Scientifico-Disciplinari di riferimento: CHIM08, CHIM09, CHIM06.