



UNIVERSITÀ  
degli STUDI  
di CATANIA

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE

Corso di laurea magistrale in Scienze chimiche

Anno accademico 2019/2020 - 1° anno - Curriculum Chimica  
Organica e Bioorganica

---

## **c.i. PROGETTAZIONE MOLECOLARE E CHIMICA INORGANICA SUPRAMOLECOLARE**

6 CFU - 2° semestre

### **Docenti titolari dell'insegnamento**

**COSIMO GIANLUCA FORTUNA** - Modulo PROGETTAZIONE MOLECOLARE - CHIM/06 - 3 CFU

**Email:** cg.fortuna@unict.it

**Edificio / Indirizzo:** Edificio 1 Viale Andrea Doria, 6

**Telefono:** 0957385037

**Orario ricevimento:** tutti i giorni previo appuntamento via mail

**ROBERTO PURRELLO** - Modulo CHIMICA INORGANICA SUPRAMOLECOLARE - CHIM/03 - 3 CFU

**Email:** rpurrello@unict.it

**Edificio / Indirizzo:** edificio 1

**Telefono:** 095 738-5095, -5118

**Orario ricevimento:** tutti i giorni previo appuntamento per posta elettronica

---

### **OBIETTIVI FORMATIVI**

- **PROGETTAZIONE MOLECOLARE**

Il corso mostrerà la rilevanza della chemioinformatica nella ricerca chimica. Nonostante i metodi chemioinformatici siano applicati prevalentemente in campo chimico-farmaceutico, lo studente sarà sensibilizzato sulla possibilità di applicare tali metodologie a svariati campi della chimica. Il corso dovrebbe permettere allo studente di acquisire le seguenti conoscenze di base:

Conoscere la definizione di chemioinformatica e la sua evoluzione storica;

Conoscere l'importanza della chemioinformatica in vari campi di ricerca chimica, con particolare attenzione alle procedure di drug discovery.

Conoscere gli aspetti economici legati alla chemioinformatica, che permette di ridurre i costi di indagine.

Conoscere gli strumenti base della chemioinformatica.

Conoscere i principi base del metabolismo dei farmaci e delle metodiche associate tale campo di ricerca.

Conoscere metodologie chemioinformatiche da applicare allo studio del metabolismo dei farmaci.

Conoscere i principi base della progettazione dei farmaci e delle metodiche classiche associate a tale campo di ricerca.

Conoscere metodologie chemioinformatiche da applicare alla progettazione dei farmaci.

Questo corso ha anche quale obiettivo quello di fornire agli studenti le basi relative all'applicazione della chimica organica fisica alla progettazione di farmaci. In particolare, si discuteranno le principali proprietà chimico-fisiche e ADME che definiscono le proprietà di un farmaco o di un candidato farmaco, con l'obiettivo di saperle modulare attraverso la modifica della struttura chimica dei composti organici in esame.

Le principali conoscenze acquisite saranno:

- 1) elementi di base sul processo di progettazione di farmaci e loro sviluppo
- 2) elementi di base relativi all'assorbimento, distribuzione, metabolismo, escrezione, tossicità (ADMET) dei farmaci
- 3) conoscenza di metodi sperimentali e in silico per la determinazione di proprietà acido-base, lipofilicità, permeabilità, solubilità.
- 4) conoscenza delle principali strategie chimiche per l'ottimizzazione delle proprietà ADME
- 5) conoscenza dei metodi per lo studio delle relazioni struttura-proprietà applicate principalmente alla progettazione dei farmaci.

---

#### ▪ **CHIMICA INORGANICA SUPRAMOLECOLARE**

Durante il corso saranno presentati i principi primi (le forze, le interazioni ed i processi) che sono alla base della chimica non covalente. Con lo sguardo rivolto ai sistemi naturali, si vuole condurre lo studente alla comprensione dei fenomeni di auto-assemblaggio per consentire una progettazione di dispositivi supramolecolari. A tale scopo sarà anche presentata una panoramica delle applicazioni attinenti alla chimica dei materiali

### **MODALITÀ DI SVOLGIMENTO DELL'INSEGNAMENTO**

#### ▪ **PROGETTAZIONE MOLECOLARE**

L'insegnamento si svolgerà tramite la trattazione dei vari argomenti riportati in programma e prevederà delle giornate dedicate ai chiarimenti dei dubbi e alla simulazione dell'esame orale da sostenere.

▪ **CHIMICA INORGANICA SUPRAMOLECOLARE**

Il corso consiste essenzialmente di lezioni frontali ed una o due esperienze in laboratorio

## PREREQUISITI RICHIESTI

▪ **PROGETTAZIONE MOLECOLARE**

Al fine di comprendere ed applicare i concetti e le tecniche oggetto del corso, è necessario avere conoscenze di chimica organica e di chimica analitica di base.

▪ **CHIMICA INORGANICA SUPRAMOLECOLARE**

Sono richieste conoscenze in Chimica inorganica, Chimica Organica e Chimica Fisica

---

## FREQUENZA LEZIONI

▪ **PROGETTAZIONE MOLECOLARE**

Fortemente consigliata seppur non obbligatoria per sostenere l'esame

▪ **CHIMICA INORGANICA SUPRAMOLECOLARE**

Così come stabilito dal Regolamento didattico del Corso di Studi

---

## CONTENUTI DEL CORSO

▪ **PROGETTAZIONE MOLECOLARE**

Concetti di chemiometria

Rappresentazione molecolare (grafi, fingerprint, MIF) e minimizzazione molecolare.

Descrittori molecolari avanzate. QSAR e 3D-QSAR.

Descrittori molecolari circolari: il metodo Moka.

Descrittori molecolari 3D: il metodo VolSurf.

Applicazioni del metodo VolSurf nel campo dell'ADME

Metodi di calcolo di bitstrings e fingerprints. Metodi di calcolo similarità molecolare.

Il metodo Flap per il calcolo della similarità molecolare.

Il metodo Flap per il calcolo dell'affinità con macromolecole.

Metodi computazionali per la predizione del metabolismo. Il metodo MetaSite. Esercitazioni al

computer

## ▪ **CHIMICA INORGANICA SUPRAMOLECOLARE**

### **Introduzione alla chimica supramolecolare: i presupposti della sintesi non covalente**

-La natura come modello: impariamo a leggere le informazioni molecolari e supramolecolari (DNA, proteine). Relazioni tra strutture (primarie, secondarie, terziarie) e funzione. Effetto allosterico. Gerarchia dell'autoassemblaggio ed inerzia cinetica: termodinamica e cinetica al lavoro

-Natura delle interazioni non covalenti. Il ruolo del solvente: solubilità e solvofobicità.

-Classificazione dei composti supramolecolari sintetici. Effetto chelante ed effetto macrociclo. Preorganizzazione e complementarità.

### **La sintesi non covalente e la sintesi covalente: un matrimonio di convenienza**

#### Autoassemblaggio

-Architetture supramolecolari, cenni di crystal engineering.

-Stereochimica supramolecolare. Chiralità intrinseca e chiralità indotta. Memoria chirale.

-Catalisi e reattività supramolecolare. Self-replication.

#### Sensori

-Interruttori ottici e chirottici. -Logic gates (YES, NOT, AND, OR, XOR) da sistemi supramolecolari.

---

## **TESTI DI RIFERIMENTO**

### ▪ **PROGETTAZIONE MOLECOLARE**

- Dispense fornite dal docente

### ▪ **CHIMICA INORGANICA SUPRAMOLECOLARE**

Appunti delle lezioni

- J.-M. Lehn, Supramolecular Chemistry, VCH
- J. W. Steed and J. L. Atwood, Supramolecular Chemistry, Wiley
- P. D. Beer, P. A. Gale and D. K. Smith Supramolecular Chemistry, OCP

## **ALTRO MATERIALE DIDATTICO**

### ▪ **PROGETTAZIONE MOLECOLARE**

Materiale didattico disponibile su studium

### ▪ **CHIMICA INORGANICA SUPRAMOLECOLARE**

Reperibile sulla piattaforma Studium

---

## PROGRAMMAZIONE DEL CORSO

### PROGETTAZIONE MOLECOLARE

Argomenti	Riferimenti testi
1 Concetti chemiometria	appunti
2 Moka	appunti
3 GRID	appunti
4 Volsurf	appunti
5 Fingerprint	appunti
6 FLAP	appunti
7 Metasite	appunti

### CHIMICA INORGANICA SUPRAMOLECOLARE

Argomenti	Riferimenti testi
1 Introduzione alla chimica supramolecolare: i presupposti della sintesi non covalente	Appunti, Lucidi e testi suggeriti dal Docente
2 Autoassemblaggio	Appunti, Lucidi e testi suggeriti dal Docente
3 Sensori Interruttori supramolecolari	Appunti, Lucidi e testi suggeriti dal Docente
4 Applicazioni future: nanomacchine	Appunti, Lucidi e testi suggeriti dal Docente

---

## VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

### MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

- **PROGETTAZIONE MOLECOLARE**

Esame orale ed esercitazione al PC

- **CHIMICA INORGANICA SUPRAMOLECOLARE**

L'esame sarà condotto partendo da un confronto sui concetti di base per passare poi alle applicazioni in maniera tale da verificare la preparazione del candidato e la sua capacità di costruire un percorso scientifico logico.

### ESEMPI DI DOMANDE E/O ESERCIZI FREQUENTI

- **PROGETTAZIONE MOLECOLARE**

Gli argomenti trattati sono tutti egualmente importanti. Non ci sono domande preferenziali.

▪ **CHIMICA INORGANICA SUPRAMOLECOLARE**

Self-assembly

Chiralità

trasferimento di energia ed elettronici

chimica delle porfirine

---