



PhD week 15-19 Aprile 2024



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI BRESCIA

MARGRATE ANYANWU

PRECISION MEDICINE

SCREENING E SVILUPPO DI MOLECOLE MIRATE AI G-QUADRUPLUX

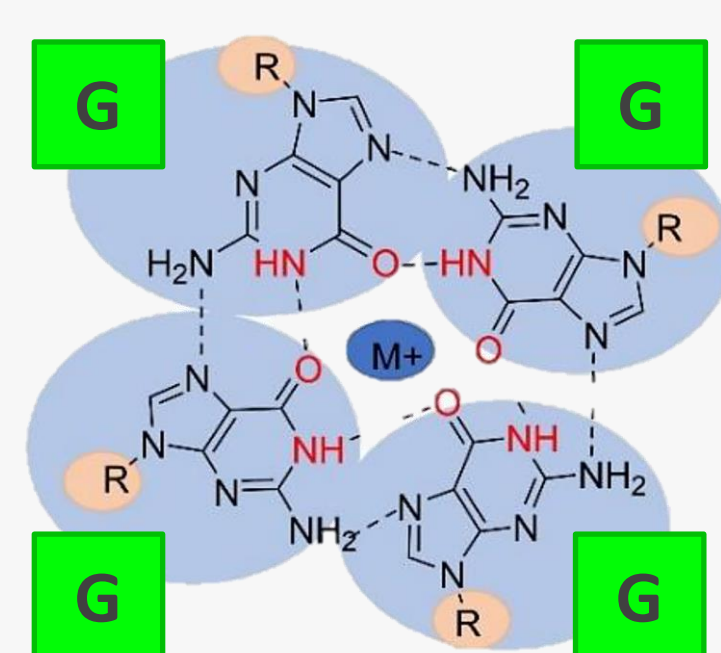
BERSAGLIO

DNA

RNA



La loro **REGOLAZIONE** avviene
in zone dei geni ricche di
guanine (G)



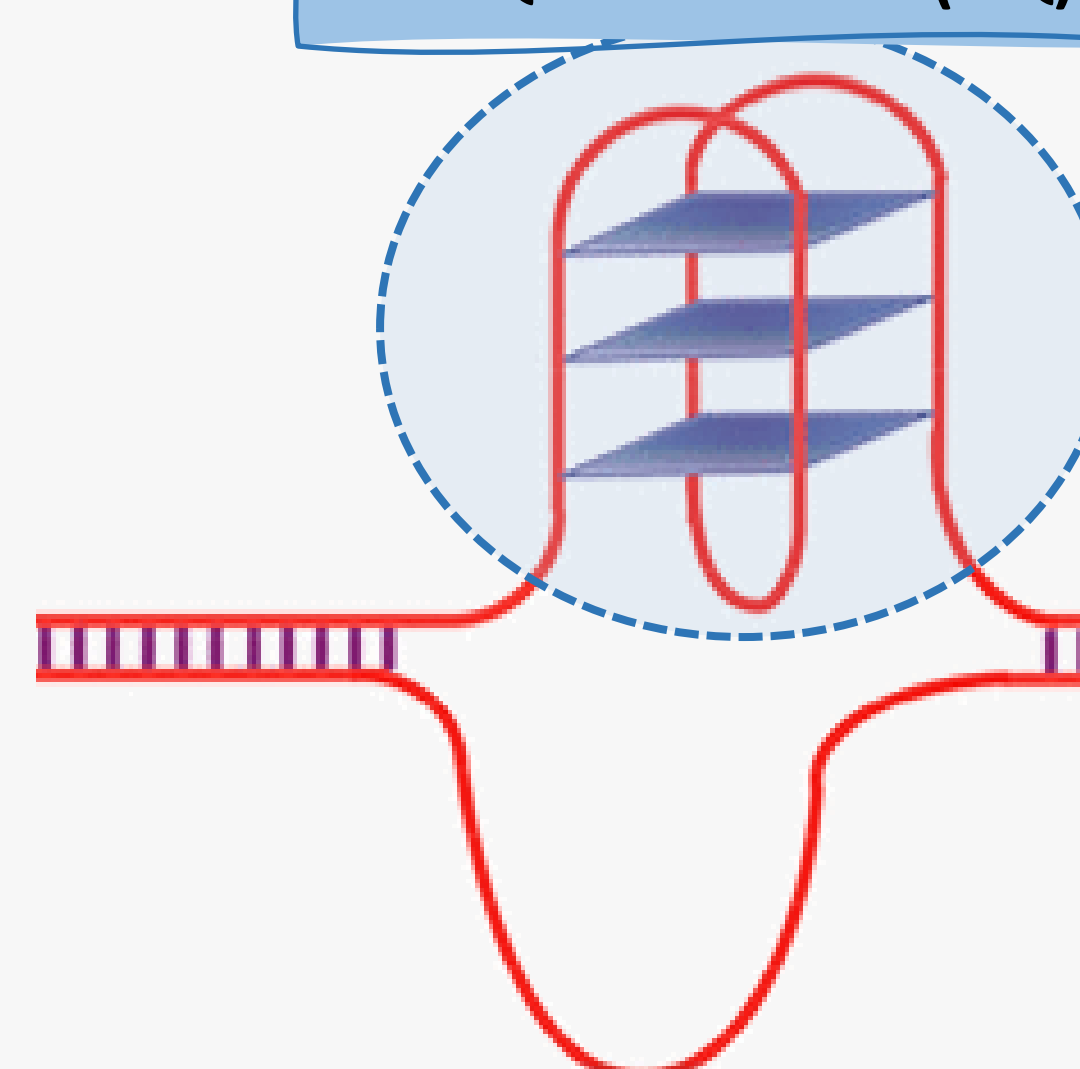
TETRADI impilate

PROCESSO DI REGOLAZIONE



TRASCRIZIONE
DUPLICAZIONE
TRADUZIONE

G-QUADRUPLUX (GQ)



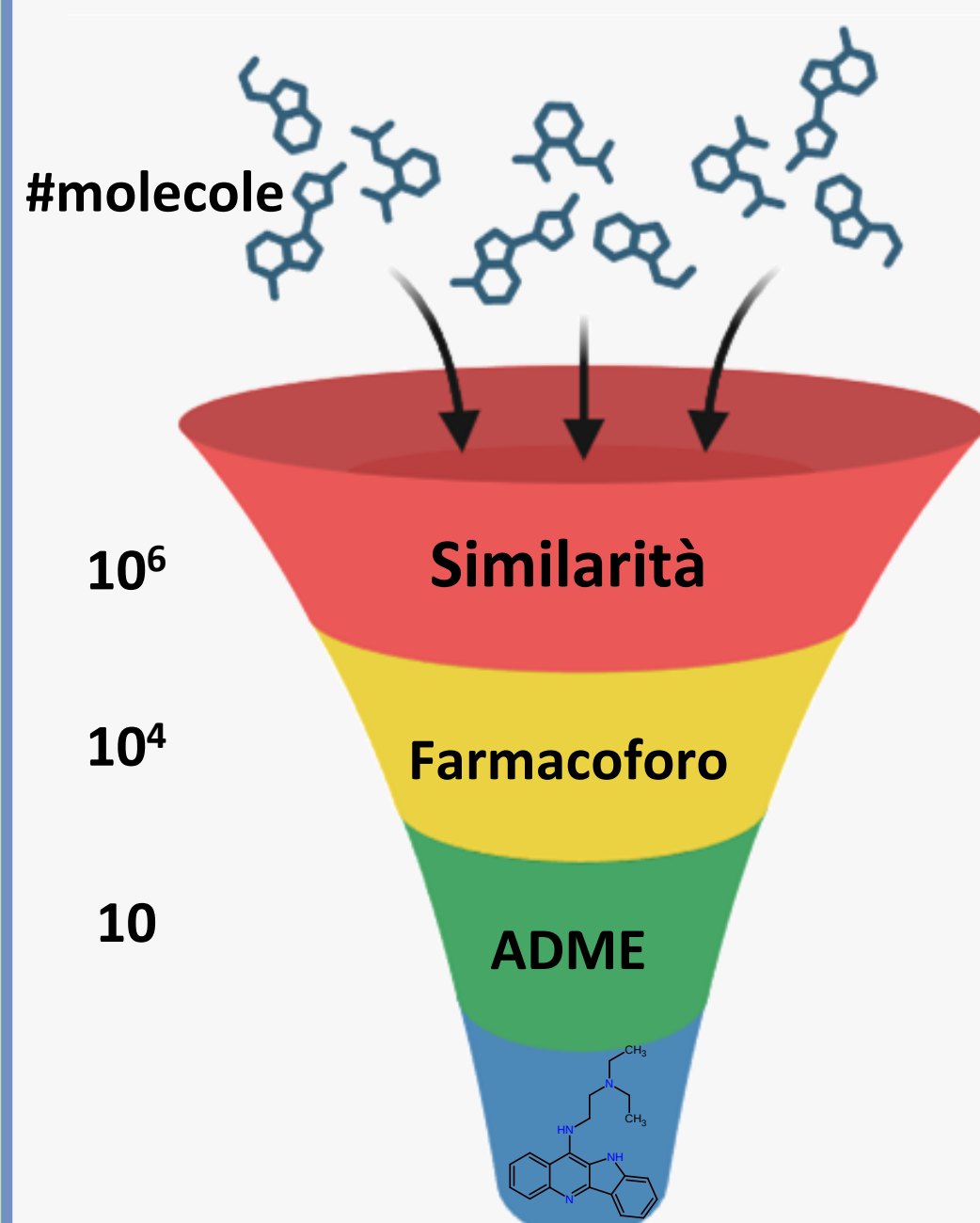
~~TRASCRIZIONE
DUPLICAZIONE
TRADUZIONE~~

GENE D'INTERESSE

OBIETTIVO

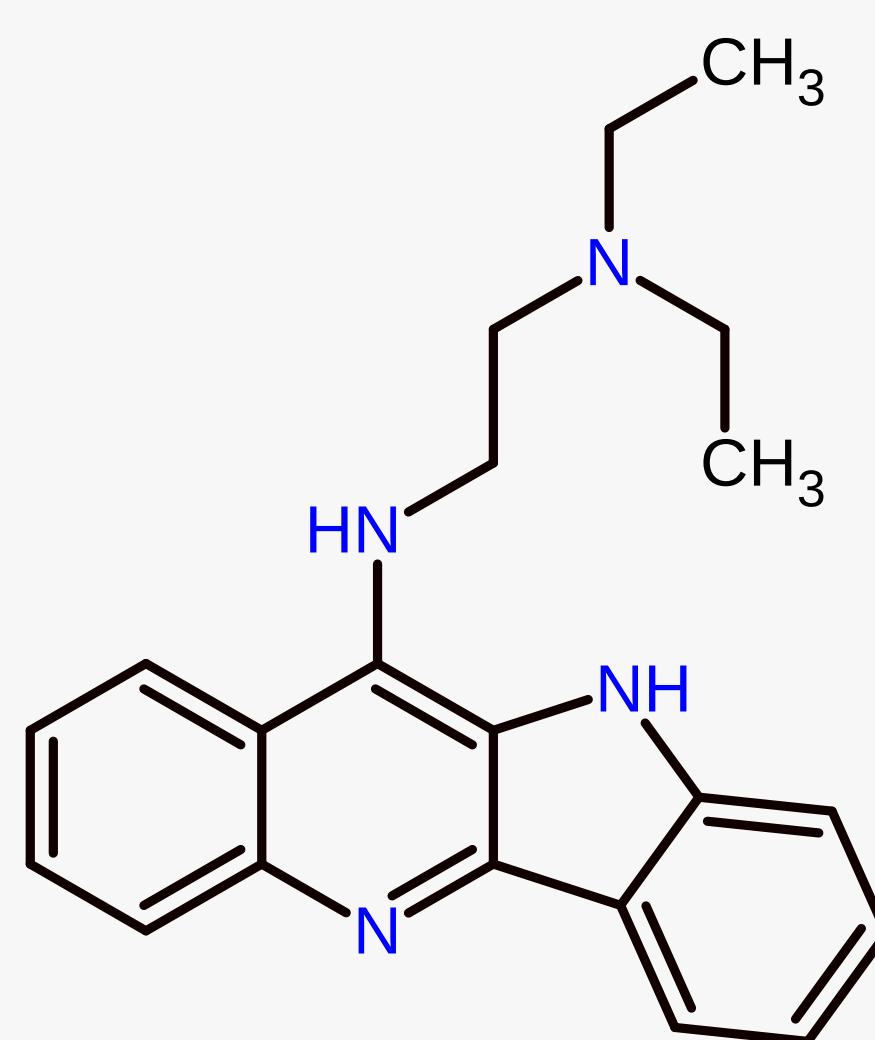
Stabilizzare G-quadruplex (bersaglio) per inibire la trascrizione dei geni coinvolti nelle patologie in esame tramite lo screening virtuale di database di molecole e il docking molecolare.

SCREENING DATABASE E TEST *IN SILICO*



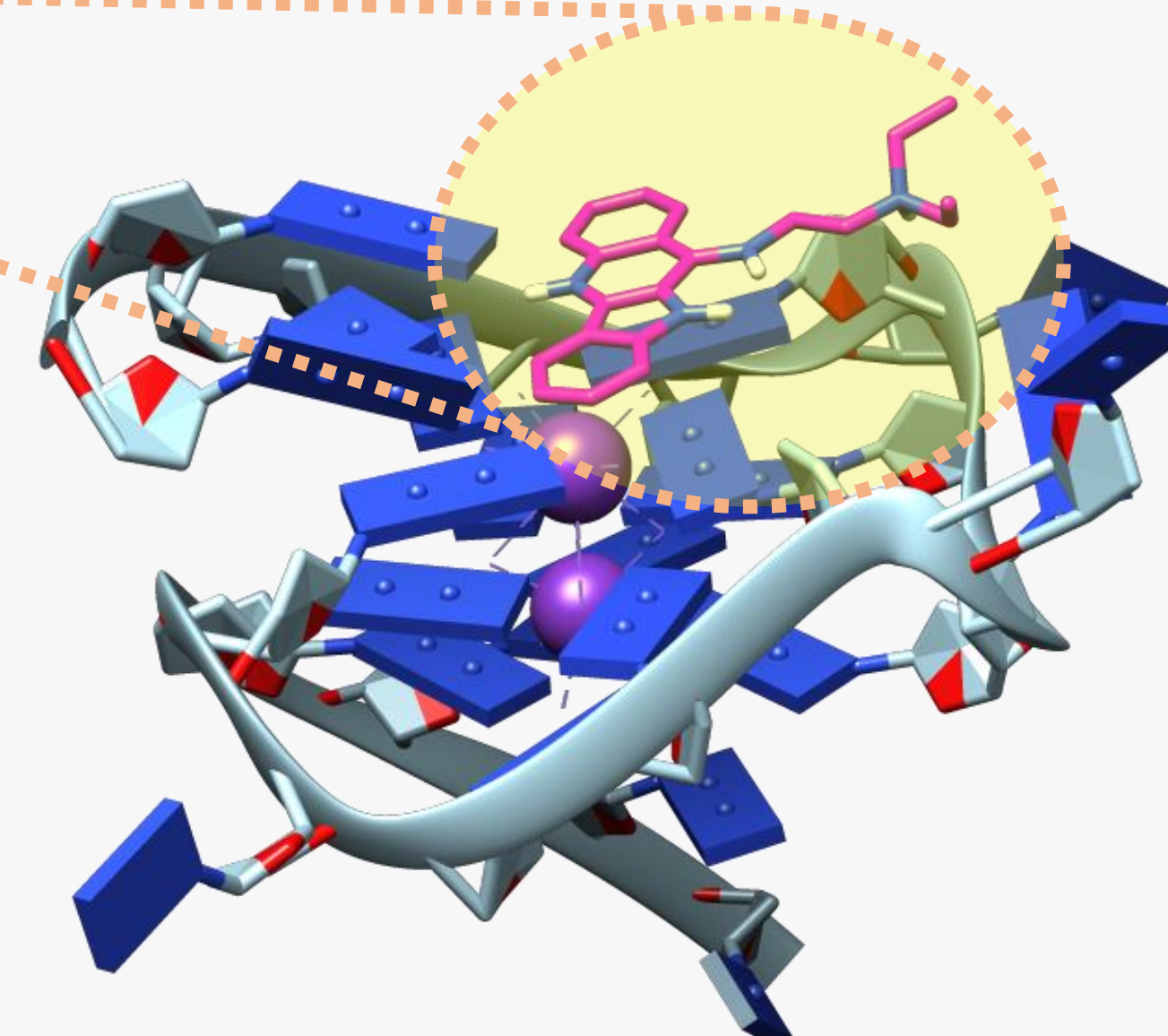
RICERCA BASATA SUL
LIGANDO

QUINDOLINA



INDIVIDUAZIONE DEL COMPOSTO MIGLIORE

PREDIZIONE INTERAZIONE QUINDOLINA-GQ



DOCKING MOLECOLARE

RIASSUMENDO

I GQs sono bersagli **utili alla lotta** di diverse patologie tra cui, alcuni tumori. Dato che la scoperta di nuovi farmaci è un processo che richiede molte risorse, per ovviare a questi problema, sono stati sviluppati diversi approcci tra cui il “**computer-aided drug design**”. Questo permette di ridurre i costi e le tempistiche degli step iniziali dello sviluppo del farmaco. Tra i metodi *in silico* più utilizzati, il docking molecolare permette di predire le interazioni tra il bersaglio e i ligandi in esame. Essendo predizioni tutti questi esperimenti *in silico* necessitano di conferme *in vitro* e *in vivo*.

CURIOSITÀ?

VISITA IL NOSTRO LAB!

MedChemLab UniBS website
<https://medchemunibs.wixsite.com/medchem>

Personal mail
margrate.anyanwu@unibs.it

