



UNIVERSITÀ DI PISA

*Messo a punto dal Dipartimento di Farmacia, si chiama MolBook UNIPI e permette la creazione, la condivisione e l'analisi dei database di molecole*



*Il prof. Tiziano Tuccinardi (sulla destra) con i membri del Gruppo di Molecular Modeling & Virtual Screening Laboratory del Dipartimento di Farmacia dell'Università di Pisa*

Pisa, 11 luglio 2023 - Gestire le librerie virtuali di composti chimici non è mai stato così facile. Solo da pochi giorni, infatti, grazie a MolBook UNIPI, il potente software lanciato dal Dipartimento di Farmacia dell'Università di Pisa nell'ambito delle attività del centro nazionale HPC, Big Data e Quantum Computing, i chimici farmaceutici e biologi di tutto il mondo hanno adesso a disposizione gratuitamente uno strumento innovativo per creare, archiviare, gestire e condividere database molecolari in pochi clic.

Una vera e propria "rivoluzione tecnologica" nel mondo della chimica farmaceutica e della biologia dove, fino ad oggi, mancava un software libero di questo tipo, in grado di rendere user-friendly le procedure per la gestione dei database, fornendo all'utente non esperto uno strumento semplice e intuitivo. E le cui potenzialità sono state analizzate nella nota applicativa recentemente pubblicata sul prestigioso *Journal of Chemical Information and Modeling*.

Sviluppato da Salvatore Galati, Miriana Di Stefano, Lisa Piazza e Giulio Poli, membri del Gruppo di Molecular Modeling & Virtual Screening Laboratory del Dipartimento di Farmacia dell'Università di Pisa, coordinato dal professor Tiziano Tuccinardi, il software MolBook UNIPI nasce per la comunità accademica e di ricerca, per trattare dati finalizzati a comporre, gestire e analizzare database contenenti informazioni relative a composti chimici, per sfruttare varie proprietà, tra cui la previsione del profilo tossicologico di molecole.

“La possibilità di archiviare digitalmente per ogni singola molecola le caratteristiche strutturali e i vari dati di attività e tossicità correlati con essa ha un'importanza essenziale perché consente di effettuare rapide ricerche, analisi delle molecole archiviate ed impiegare l'intelligenza artificiale per elaborare e predire le proprietà delle diverse molecole. È possibile, ad esempio, in pochi secondi cercare tutte le molecole caratterizzate da un particolare gruppo funzionale o da una particolare attività biologica, o predire la loro possibile tossicità - spiega il prof. Tiziano Tuccinardi - Ad oggi esistono alcuni tool che consentono la creazione di questi database molecolari; tuttavia, molti di questi non consentono l'esecuzione di analisi esaustive ed inoltre, la maggior parte sono molto difficili da utilizzare perché rivolti soprattutto a ricercatori operanti nel campo della chimica computazionale”.

“Il software sviluppato dal nostro gruppo di ricerca consentirà anche ai chimici non computazionali, ai biologi e chimici farmaceutici di poter creare, gestire e condividere i database delle proprie molecole di interesse. Questa release di MolBook UNIPI rappresenta il primo tassello di questo progetto: la nostra idea è quella di implementarlo aggiungendo tool predittivi basati sull'intelligenza artificiale che in maniera semplice ed intuitiva possano aiutare la ricerca fornendo fin dai primi stadi di sviluppo di potenziali farmaci delle predizioni relative alla loro possibile tossicità e attività nei confronti dei diversi target molecolari”.

MolBook UNIPI è disponibile gratuitamente per le organizzazioni accademiche, governative e industriali e lo si può scaricare dal sito [www.molbook.farm.unipi.it](http://www.molbook.farm.unipi.it)

*Progetto sviluppato anche grazie al contributo del Piano Nazionale di Ripresa e Resilienza (PNRR), Missione 4 Componente 2 Investimento 1.4 "National Centre for HPC, Big Data and Quantum Computing" - Spoke 7 "Materials & Molecular Sciences" (Unione Europea – NextGenerationEU).*