

Progetto 2 di Idoneità Informatica Pratica

Nome Cognome, a.a. 2015/2016

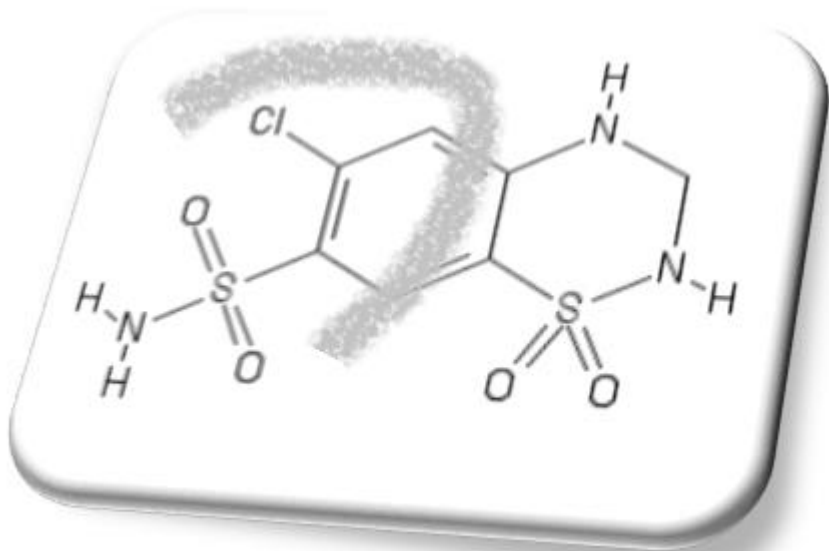
CdL CTF

Università degli Studi di Trieste

Esidrex

- Principio Attivo :
- Categoria farmacoterapeutica:
- Indicazioni terapeutiche:

(Fonte: “foglietto illustrativo” database [dell’Agenzia Italiana del Farmaco](#))

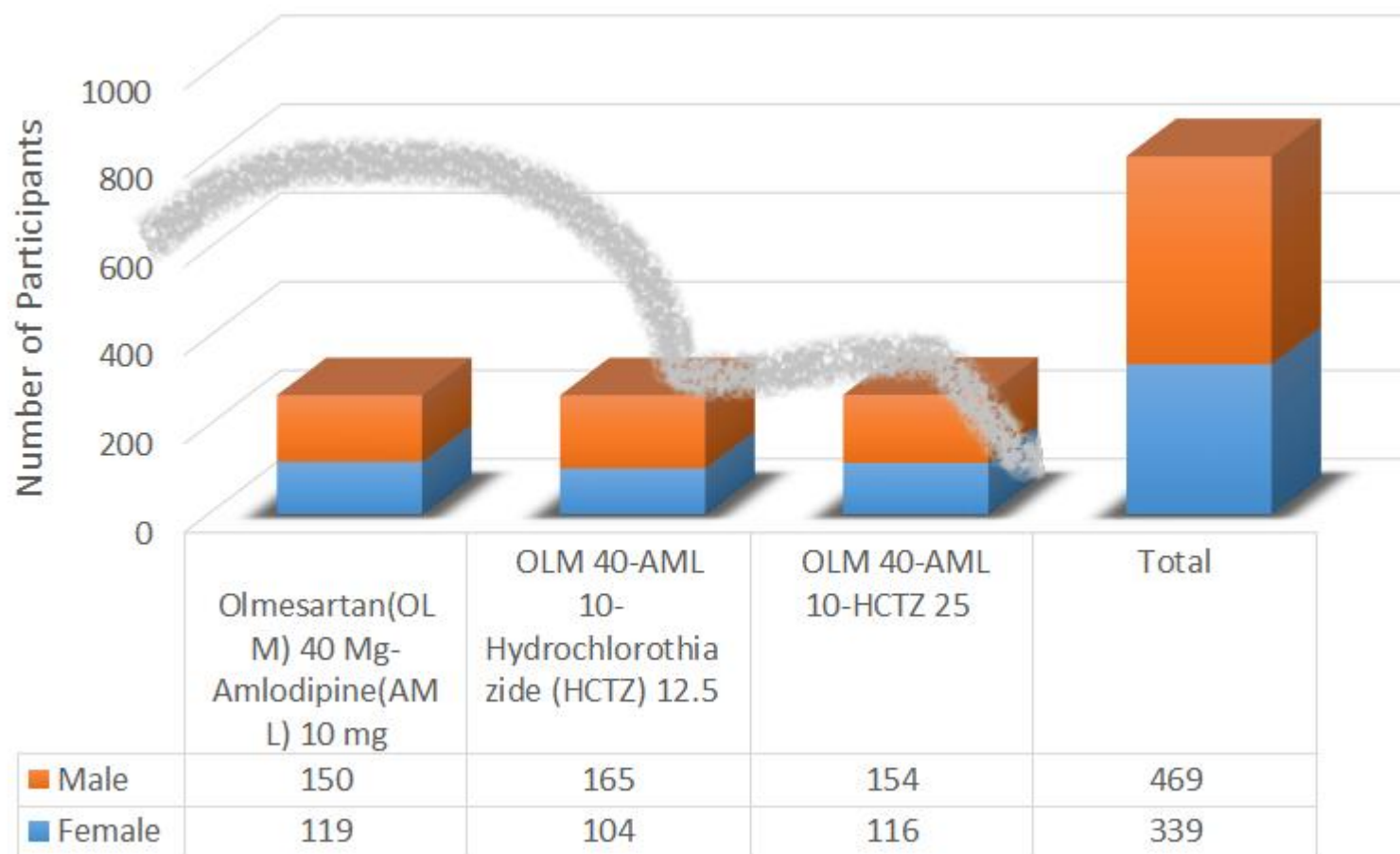


Per fare l’immagine qui a sinistra:

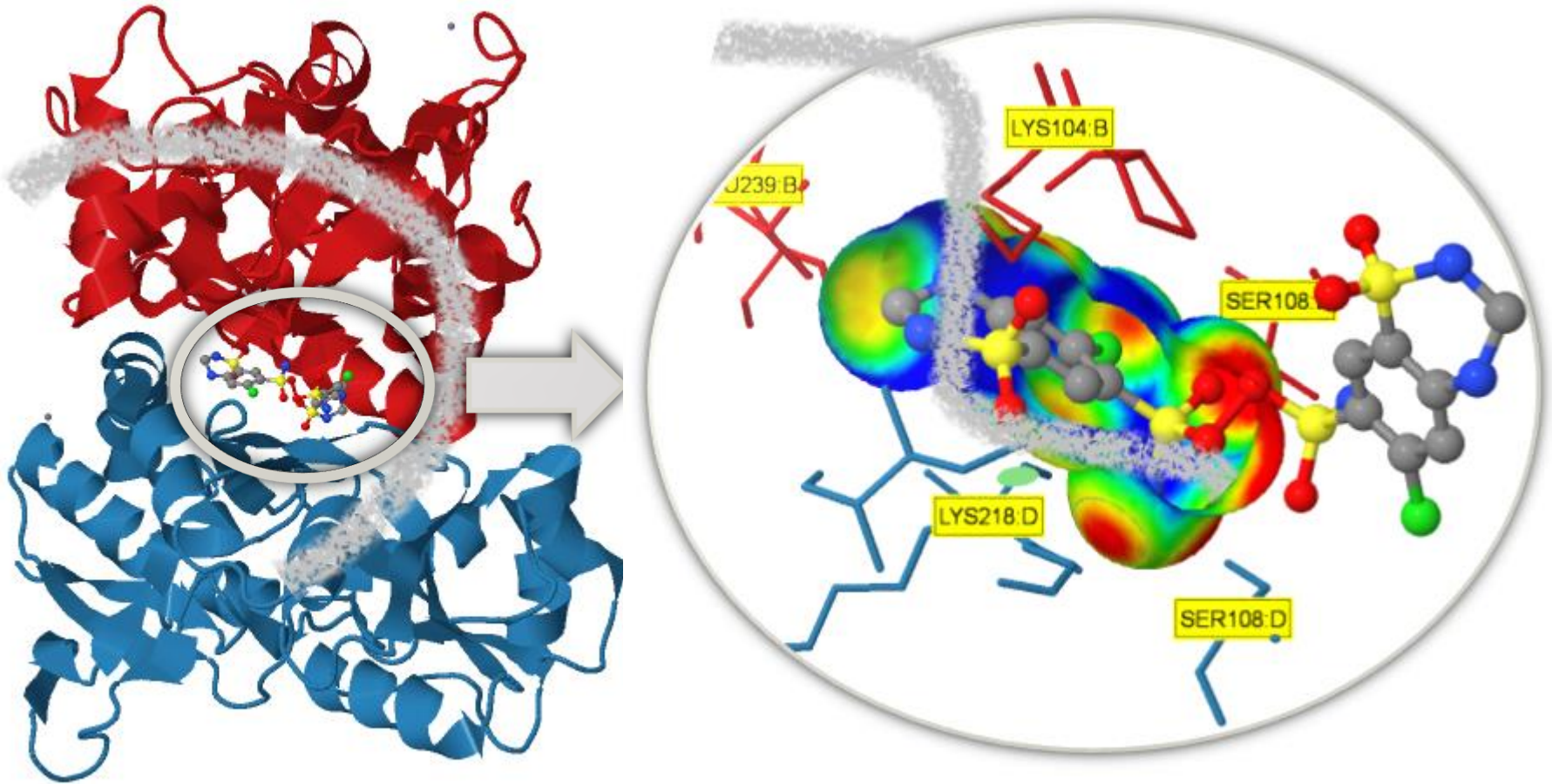
1. Cercare su [google](#) il nome del farmaco in inglese
2. Cercare il farmaco su [ChEMBL database](#)
3. Copiare codice SMILEY
4. Disegnarlo con [PubChem Sketcher](#)

Hydrochlorothiazide Clinical Trial

«[Hydrochlorothiazide as add-on to Olmesartan/Amlodipine in Hypertension](#)» (Baseline Measures)

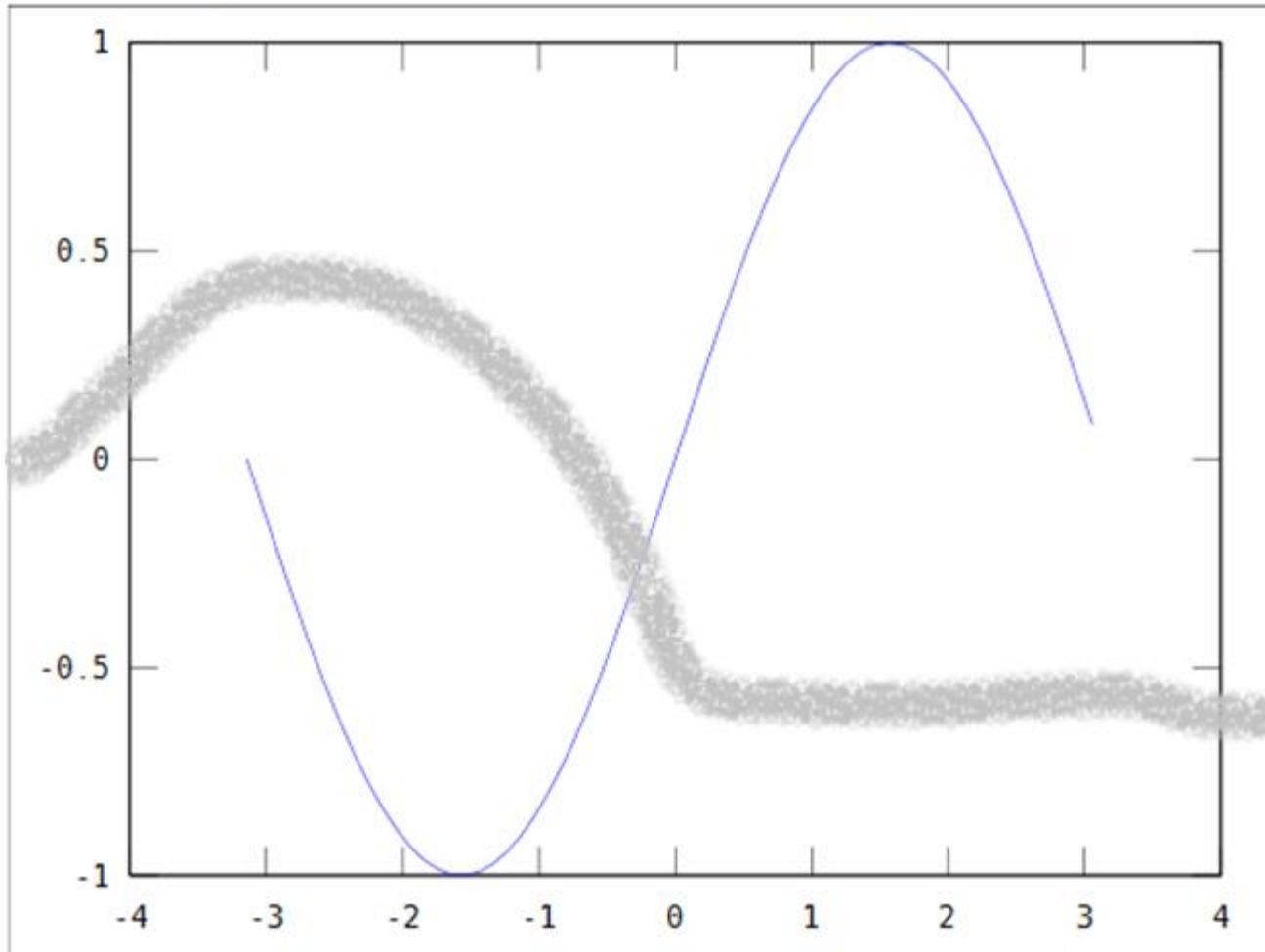


[PDB 3IJX](#): Crystal structure of the AMPA subunit
GluR2 bound to the allosteric modulator,
hydrochlorothiazide



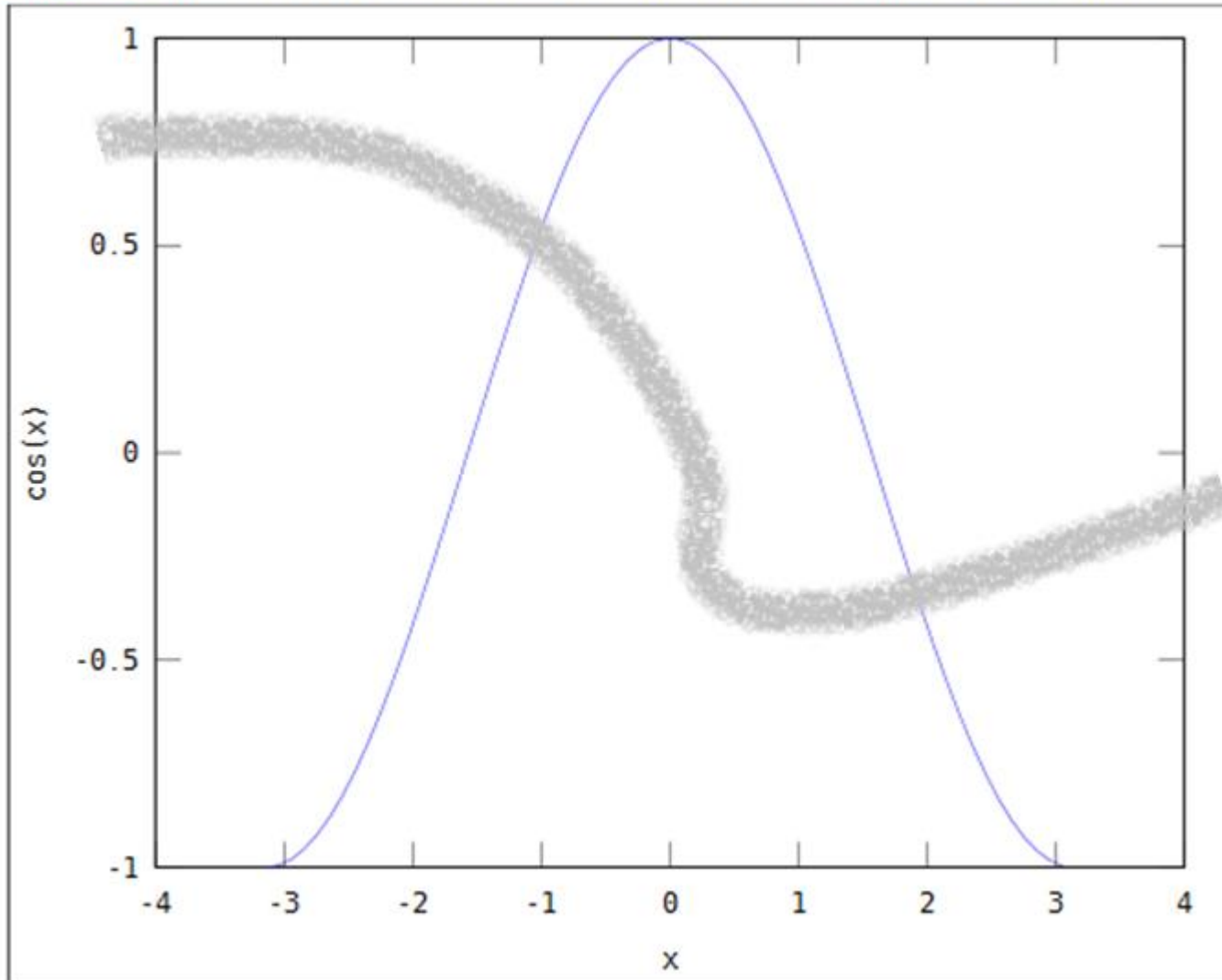
Octave/Matlab: funzioni trigonometriche

```
octave:1> pi  
ans = 3.1416  
octave:2> lista=(-pi:0.1:pi);  
octave:3> plot(lista,sin(lista))
```



Octave/Matlab: funzioni trigonometriche

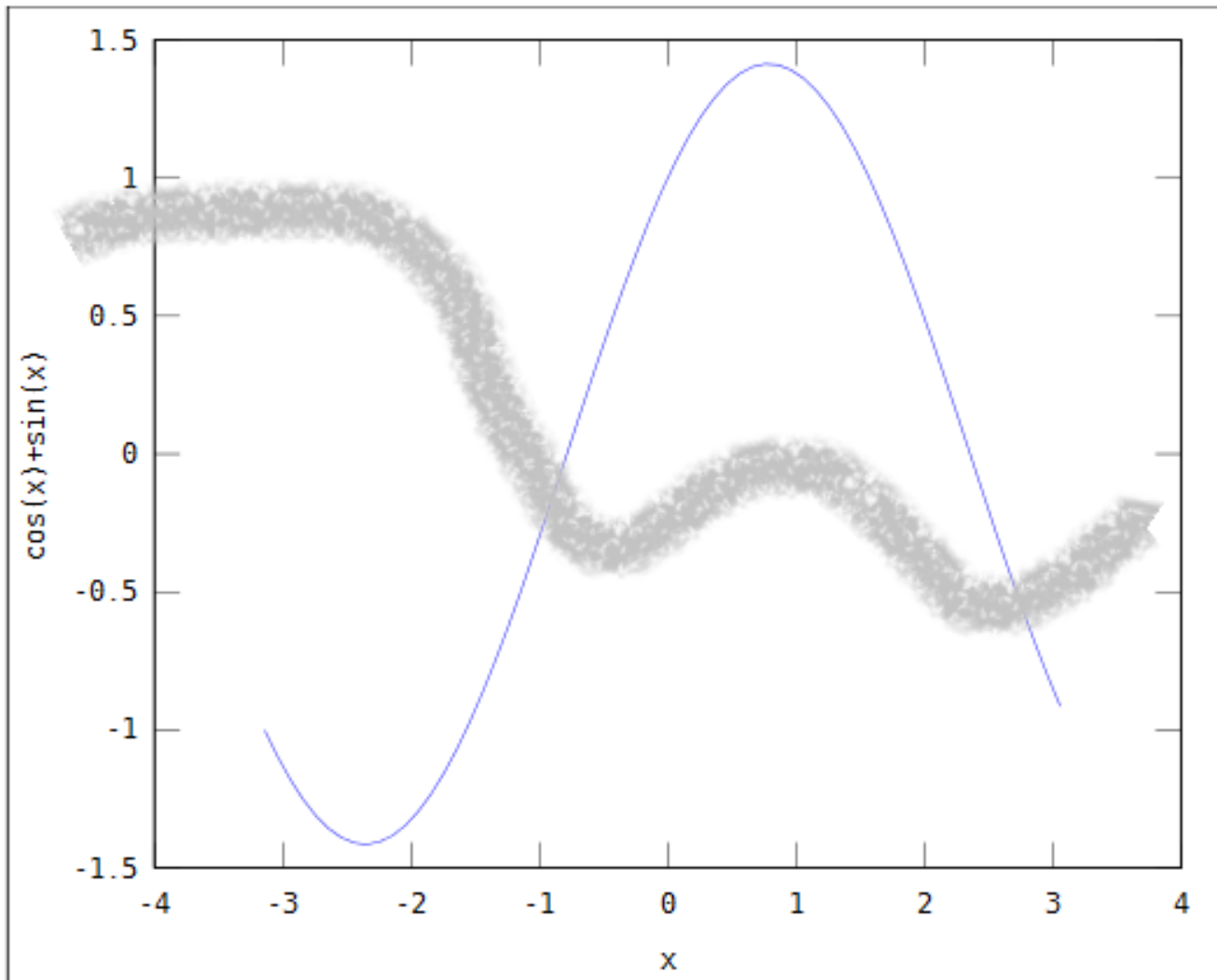
```
octave:4> plot(lista,cos(lista)); xlabel("x"); ylabel("cos(x)")
```



Octave/Matlab: creare una funzione personalizzata con il comando «function ... end»

```
octave:5> function y=cossen(x); y=cos(x)+sin(x); end
```

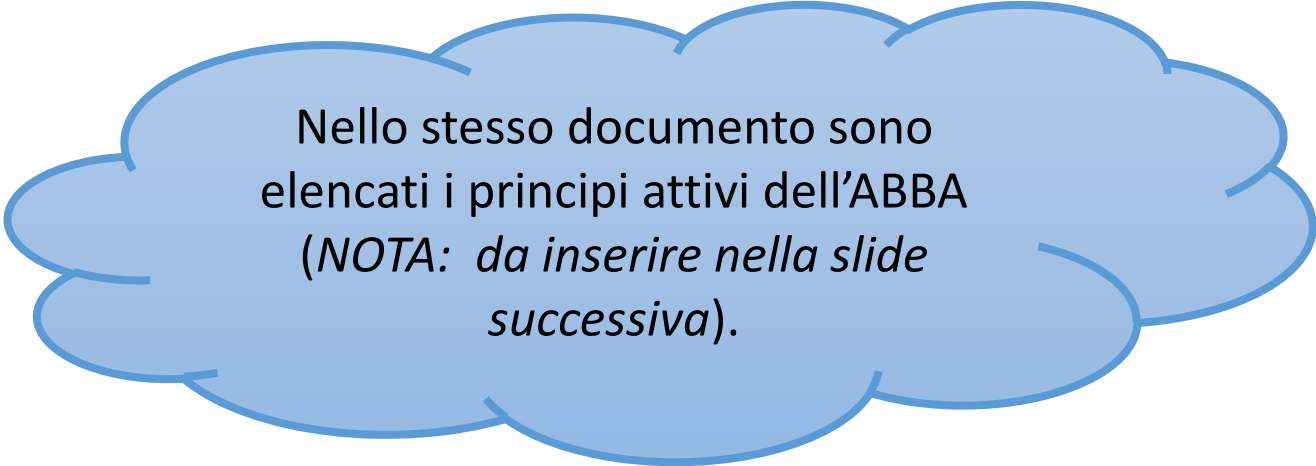
```
octave:6> plot(lista,cossen(lista)); xlabel("x"); ylabel("cos(x)+sin(x)")
```



ABBA – Caratteristiche generali

Secondo il «riassunto delle caratteristiche del prodotto» reso disponibile nel database dell'[Agenzia Italiana del Farmaco](#), il farmaco ABBA esiste in due formati:

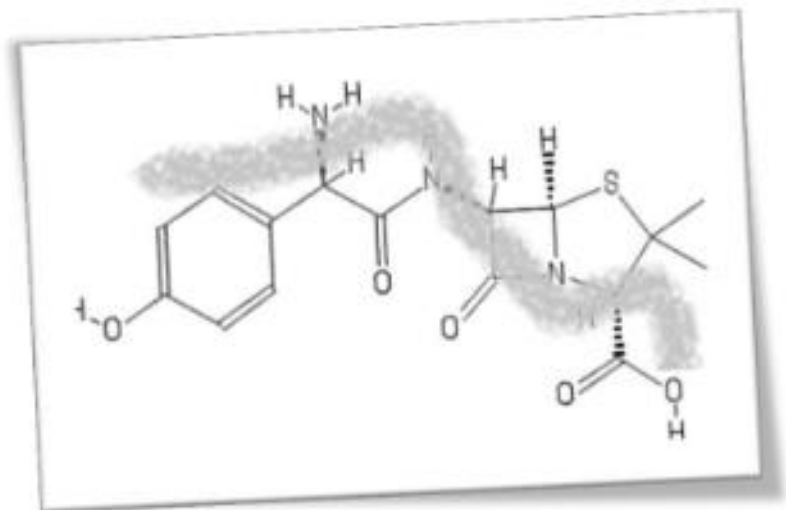
-
-



Nello stesso documento sono elencati i principi attivi dell'ABBA
(*NOTA: da inserire nella slide successiva*).

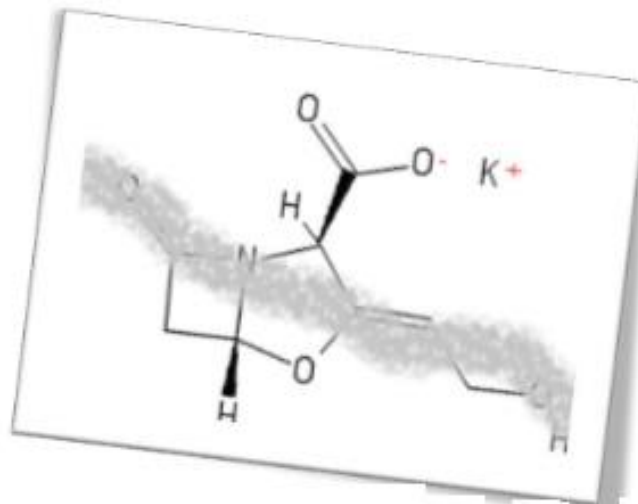
ABBA – Principi attivi

QUI indicarne il nome



- File *.mol da [ChemBI](#)
- Importato in [PubChem Sketcher](#)

QUI indicarne il nome



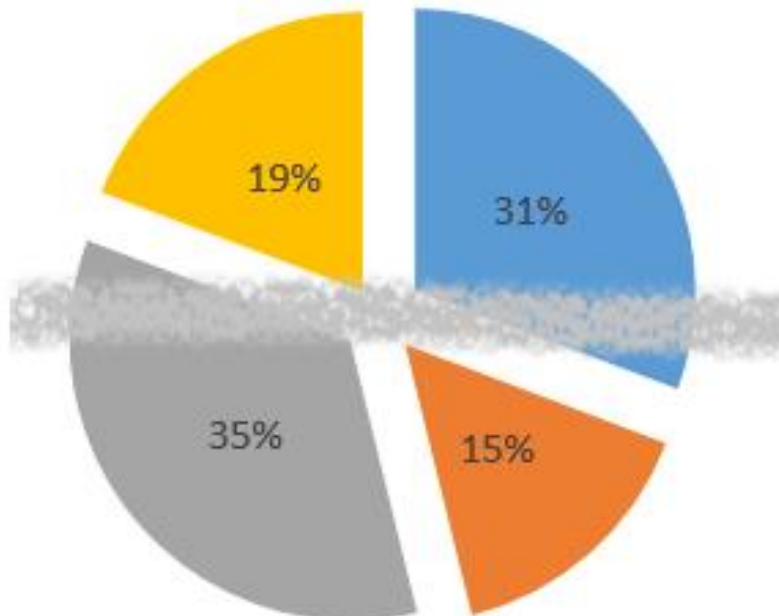
- Struttura dell'acido da [ChemBI](#) file *.mol
- Importato in [PubChem Sketcher](#)
- Modificato nel suo sale di potassio

Clavulanic Acid Clinical Trial

distribuzione partecipanti per lo studio clinico
(NOTA: Riempire la tabella e poi fare il grafico in Excel)

participants

■ Female Test ■ Male Test ■ Female Control ■ Male Control



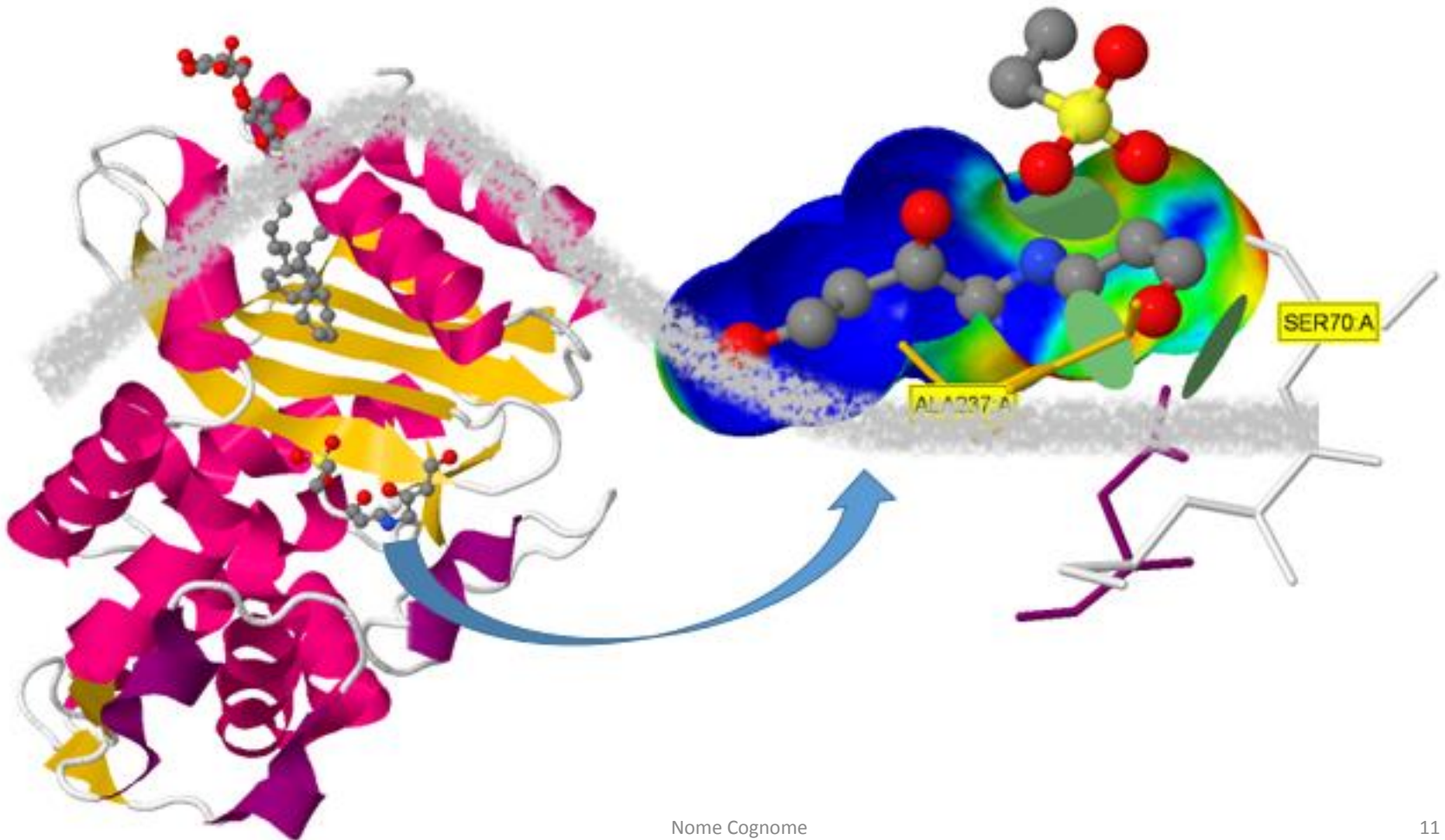
	Test participants	Reference participants
Female		
Male		
Total		

FonteDati:

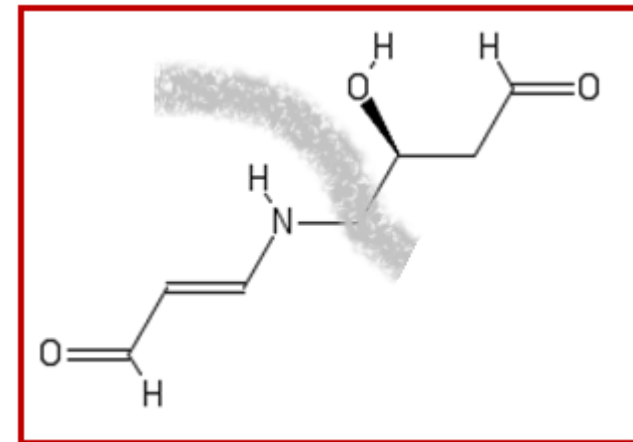
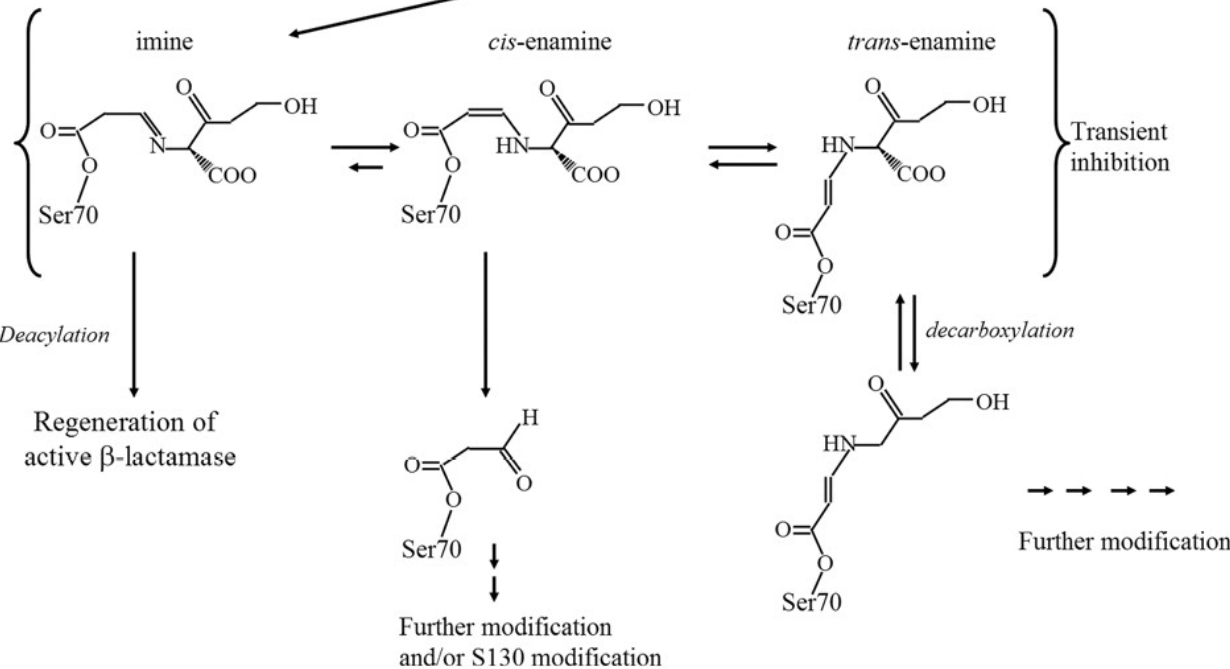
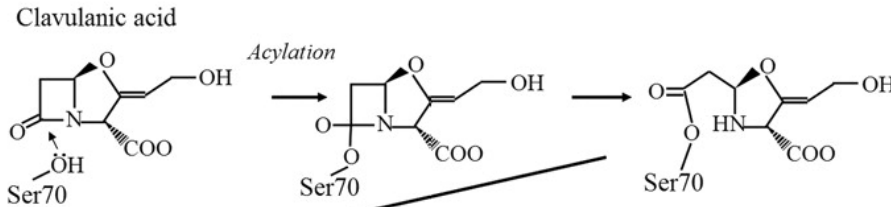
[“Amoxicillin-Clavulanic Acid 400 mg-57 mg Chewable Tablets Under Fasting Conditions”](#)

Clavulanic Acid Biological Target

- ❑ Secondo il [DrugBank](#) Il primo target del Clavulanic Acid è *Beta-lactamase*
- ❑ nel [Protein Data Bank](#) trovare la struttura cristallografica **2A49**



Perche' non si vede il clavulanic acid nella struttura cristallografica precedente?



N-(2-HYDROXY-4-OXO-BUTYL)-N-(3-OXO-TRANSPROPENYL)AMINE

(2005) J.Biol.Chem. **280**: 34900-34907