

---

# PROGETTO DI IDONEITÀ INFORMATICA PRATICA

---

Nome Cognome, a.a. 2017/2018, CdL Farmacia

## Sommario

Indice delle figure .....	1
Indice delle tabelle.....	1
1. Tamiflu .....	2
1.1 Caratteristiche generali .....	2
1.2 L'influenza aviaria del 2009/2010.....	3
2. Analisi Dati .....	4
3. Valium.....	5
3.1 Caratteristiche generali .....	5
5. ABBA .....	6
5.2 Target Biologico .....	6

## Indice delle figure

Figura 1 il principio attivo del Tamiflu, disegnato con PubChem Sketcher importando il file *.mol dal drugbank database. ....	2
Figura 2 - Mortalità durante l'influenza aviaria del 2009/2010, dati da Tabella 2. ....	3
Figura 3 - Il peso del cervello e quello corporeo di una serie di mammiferi sono linearmente correlati. ....	4
Figura 4 - confronto tra frequenza di pesi corporei e frequenza di pesi cerebrali. ....	4
Figura 5 Il principio attivo del Valium. ....	5
Figura 6 (a) Struttura cristallografica di BlaC-E166A legata covalentemente con Amoxicillin, (b) dettaglio del sito di legame del farmaco. ....	6

## Indice delle tabelle

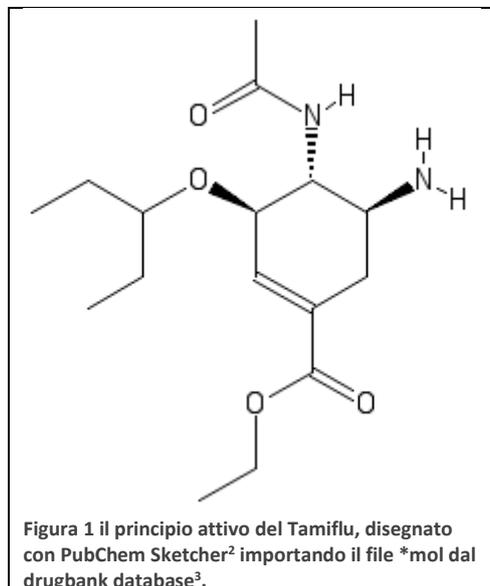
Tabella 1 – I 4 target su cui opera il principio attivo del Tamiflu, come riportato nel DrugBank database <sup>3</sup> .....	2
Tabella 2 “Characteristics of pooled dataset of 29,234 patients hospitalised with A(H1N1)pdm09 virus infection included in mortality analysis” .....	3

# 1. Tamiflu

## 1.1 Caratteristiche generali

Secondo il foglietto illustrativo reso disponibile nel database dell'Agenzia Italiana del Farmaco<sup>1</sup> il Tamiflu è generalmente usato negli adulti:

- ✓ Tamiflu è usato negli adulti, negli adolescenti, nei bambini e nei lattanti (inclusi neonati a termine) per il trattamento dell'influenza. Può essere utilizzato quando avverte sintomi influenzali e il virus dell'influenza sta circolando nella comunità.
- ✓ Tamiflu può essere inoltre prescritto agli adulti, agli adolescenti, ai bambini e ai lattanti di età superiore a 1 anno, caso per caso, per prevenire l'influenza, per esempio se è stato a contatto con qualcuno che ha l'influenza.
- ✓ Tamiflu può essere prescritto agli adulti, agli adolescenti, ai bambini e ai lattanti (inclusi neonati a termine) come trattamento preventivo in circostanze eccezionali, per esempio se vi è un'epidemia globale di influenza (pandemia influenzale) e il vaccino influenzale stagionale non riesce a garantire una protezione sufficiente.



Il suo principio attivo è **Oseltamivir**, la cui struttura molecolare è riportata in Figura 1. Secondo il DrugBank database<sup>3</sup>, questo principio attivo opera su 4 target distinti come riportato in Tabella 1 (*NOTA: completare la tabella*).

Tabella 1 – I 4 target su cui opera il principio attivo del Tamiflu, come riportato nel DrugBank database<sup>3</sup>.

Index	Name	Organisms	Pharmacological Action
1	Neuraminidase	Influenza A virus (strain A/Chile/1/1983 H1N1)	Yes
2	Liver carboxylesterase 1	Human	Yes
3	Sialidase-1	Human	Unknown
4	Sialidase-2	Human	Unknown

<sup>1</sup> <https://farmaci.agenziafarmaco.gov.it/>

<sup>2</sup> <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/edit2/index.html>

<sup>3</sup> <http://www.drugbank.ca/>

## 1.2 L'influenza aviaria del 2009/2010

Il target principale del Tamiflu è una proteina dell'Influenza A virus (strain A/Chile/1/1983 H1N1). Citando l'articolo di Ref.[1] "Neuraminidase inhibitors were widely used during the 2009–10 influenza A H1N1 pandemic, but evidence for their effectiveness in reducing mortality is uncertain." I loro risultati di mortalità sono riportati in Tabella 2 ed elaborati graficamente in Figura 2.

Tabella 2 "Characteristics of pooled dataset of 29,234 patients hospitalised with A(H1N1)pdm09 virus infection included in mortality analysis"

Characteristic (denominator)	All hospitalised patients	Deceased	Survived
Number of patients	29234	2784	26450
Number of male cases	14431	1433	12998

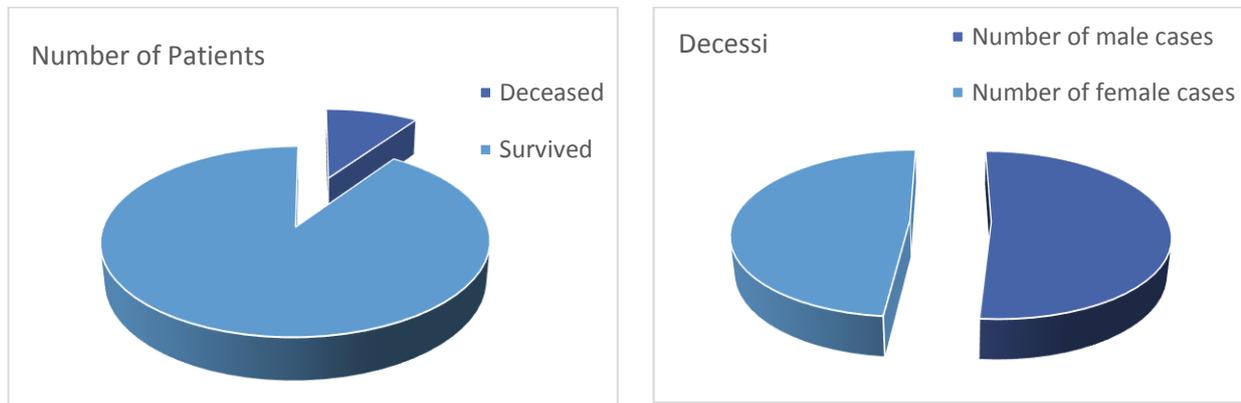


Figura 2 - Mortalità durante l'influenza aviaria del 2009/2010, dati da Tabella 2.

## 2. Analisi Dati

Il dataset presente al seguente link: <http://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/datasets/regression/x01.txt> riporta il peso del cervello e quello corporeo di 62 mammiferi (*NOTA: salvare i dati come testo, usare il Blocco Note di Windows per sostituire le virgole ai punti, e aprire il file con Excel*). I dati sono elaborati in Figura 3 e Figura 4.

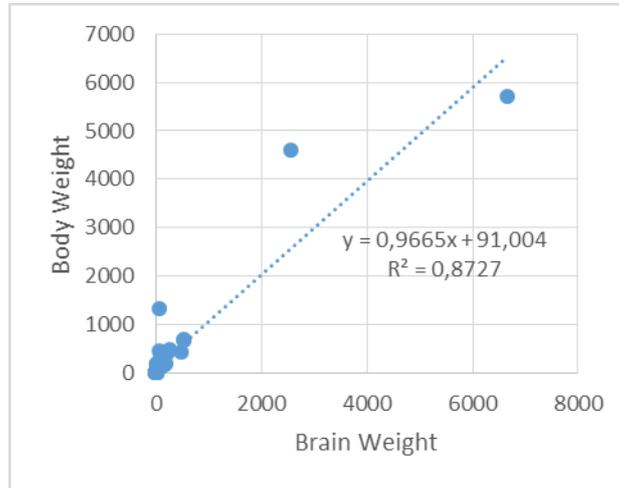


Figura 3 - Il peso del cervello e quello corporeo di una serie di mammiferi sono linearmente correlati.

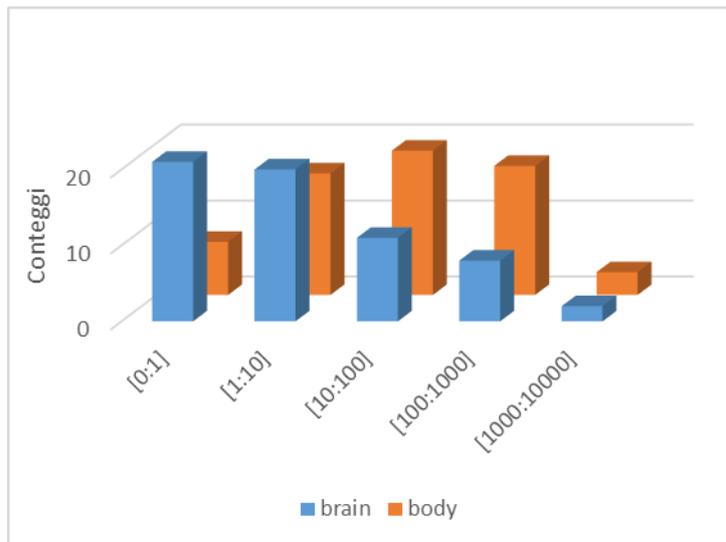


Figura 4 - confronto tra frequenza di pesi corporei e frequenza di pesi cerebrali.

## 3.Valium

### 3.1 Caratteristiche generali

Secondo il foglietto illustrativo reso disponibile nel database dell'Agenzia Italiana del Farmaco<sup>4</sup>, le indicazioni terapeutiche del Valium sono **Ansia, tensione ed altre manifestazioni somatiche o psichiatriche associate con sindrome ansiosa. Insonnia**. Il suo principio attivo è **diazepam** e il codice SMILEY del principio attivo, che può essere trovato sul DrugBank database<sup>5</sup>, è **CN1C2=C(C=C(Cl)C=C2)C(=NCC1=O)C1=CC=CC=C1** Dal codice SMILEY è possibile disegnare la sua struttura molecolare con PubChem Sketcher<sup>6</sup> (vedi Figura 5).

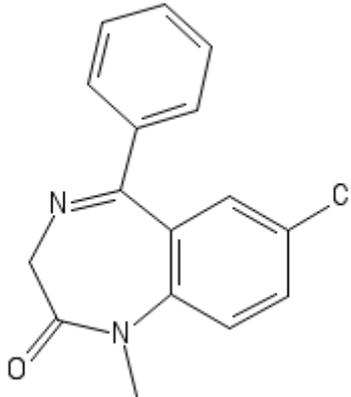


Figura 5 Il principio attivo del Valium.

Sempre secondo il DrugBank Database<sup>5</sup>, la molecola interagisce con molteplici target. Il primo è **Gamma-aminobutyric acid receptor subunit alpha-1** il cui UniProt ID è **P14867** e la cui funzione è **component of the heteropentameric receptor for GABA, the major inhibitory neurotransmitter in the vertebrate brain. Functions also as histamine receptor and mediates cellular responses to histamine. Functions as receptor for diazepam and various anesthetics, such as pentobarbital; these are bound at a separate allosteric effector binding site. Functions as ligand-gated chloride channel** (NOTA: cliccando sull'uniprot ID è possibile ottenere le informazioni sulla proteina stessa)

<sup>4</sup> <https://farmaci.agenziafarmaco.gov.it/bancadatifarmaci/>

<sup>5</sup> <https://www.drugbank.ca/>

<sup>6</sup> <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/edit2/index.html>

## 5. ABBA

### 5.2 Target Biologico

Secondo il DrugBank<sup>7</sup> il primo target del Amoxicillin è Penicillin - binding protein 1A. Cercando i due nel Protein Data Bank<sup>8</sup>, trovo la struttura cristallografica 3N7W la cui struttura e sito di legame sono riportati in Figura 6.

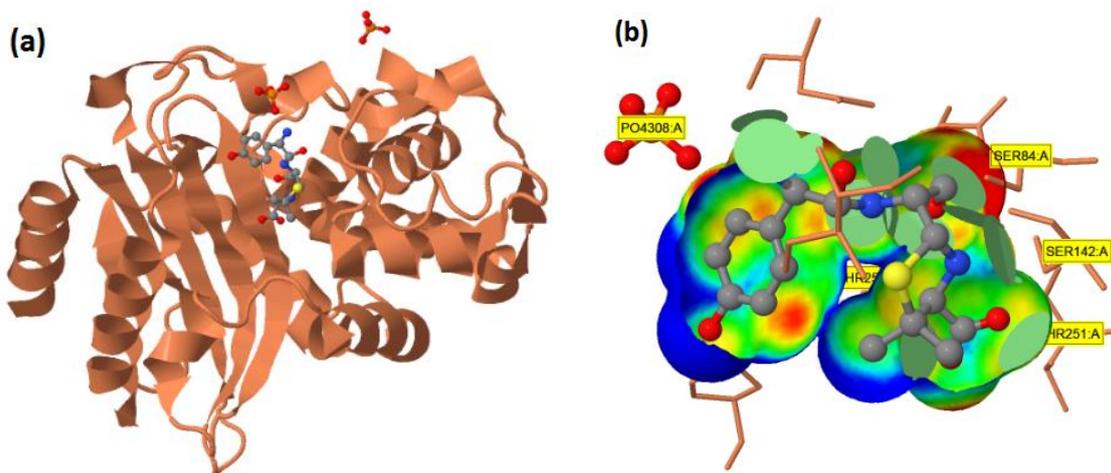


Figura 6 (a) Struttura cristallografica di BlaC-E166A legata covalentemente con Amoxicillin, (b) dettaglio del sito di legame del farmaco.

<sup>7</sup> <http://www.drugbank.ca/>

<sup>8</sup> <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>