

C.I.BIOLOGIA E BIOINFORMATICA STRUTTURALE E FARMACI E TRASCRIPTOMA 8 CFU

BIOLOGIA E BIOINFORMATICA STRUTTURALE (BIO/11) 6 CFU

Prof. Mattia Falconi ***Programma***

Caratteristiche delle catene laterali degli amminoacidi, loro reattività e frequenza nelle proteine. Le interazioni deboli: interazioni elettrostatiche, legame idrogeno, effetto idrofobico. Il processo del “folding”, “unfolding” e “misfolding”. Il problema del folding *in vivo* e meccanismi di controllo. Definizione dei principali domini strutturali. Descrizione di alcuni modelli di riconoscimento molecolare. Programmi per la visualizzazione e la manipolazione delle macromolecole. Caratteristiche conformazionali delle proteine e degli acidi nucleici. Metodi per la predizione della struttura secondaria delle proteine e dell’RNA. Metodi per la ricerca della similarità strutturale delle e Threading, metodi *Ab initio*. Introduzione al Drug Design, come si progetta un farmaco. Overview delle metodologie di Docking e scoring e la metodologia del Virtual Screening.