

LAUREA MAGISTRALE IN BIOINFORMATICA

Corso: **Biologia e Bioinformatica Strutturale 6 CFU**

Prof. Mattia Falconi

- 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 proteine.
- Banche dati delle macromolecole.
- Modellazione per omologia, metodi di Fold recognition, Threading e metodi *ab initio*.
- Introduzione al Drug Design, come si progetta un farmaco.
- Introduzione alle metodologie del docking e scoring, la metodologia del virtual screening.

Il corso prevede 3 esercitazioni pratiche:

- Uso del programma di grafica molecolare CHIMERA.
- Modellazione per omologia con il programma SwissPDBviewer.
- Docking proteina-ligando con il programma AutoDock.

LIBRI DI TESTO:

- 1) Introduzione alla Struttura delle Proteine. Carl Branden , John Tooze. Ed. Zanichelli.
- 2) Bioinformatica, dalla Sequenza alla Struttura delle Proteine. S.Pascarella, A.Paiardini. Ed. Zanichelli.

URL <http://structuralbiology.bio.uniroma2.it>