UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

COURSE SYLLABUS

Structures and Molecular Interactions

2122-2-F5401Q043

Obiettivi

L'insegnamento si propone di fornire agli studenti le basi concettuali e gli strumenti applicativi della bioinformatica per lo studio delle relazioni struttura-funzione nelle macromolecole biologiche e nei network metabolici.
Al termine dell'insegnamento lo studente conoscerà le basi teoriche dei principali metodi bioinformatici e computazionali adatti a studiere le relazioni tra struttura e funzione e saprà utilizzare in modo critico i principali programmi per studiare le relazioni struttura funzione in macromolecole biologiche e network metabolici.

Conoscenza e capacità di comprensione
Al termine dell'insegnamento lo studente dovrà conoscere le basi teoriche e le tecniche computazionali più importatnti per studiare le relazioni struttura-funzione nelle biomolecole

Capacità di applicare conoscenza e comprensione
Al termine dell'insegnamento lo studente dovrà essere in grado di applicare le conoscenze acquisite alle materie che studierà nel secondo semestre

Autonomia di giudizio
Lo studente dovrà essere in grado di elaborare quanto appreso nel corso e saper interpretare e discutere criticamente le teorie e i metodi riguardanti lo studio delle relazioni struttura-funzione.

Abilità comunicative
Alla fine dell'insegnamento lo studente saprà esprimersi in modo appropriato nella descrizione delle teorie e dei metodi riguardanti lo studio delle relazioni struttura funzione, con proprietà di linguaggio e sicurezza di esposizione.

Capacità di apprendimento
Alla fine dell'insegnamento lo studente avrà le competenze necessarie per affrontare in autonomia gli studi successivi che richiedano competenze riguardanti le relazioni struttura funzione e saprà applicare le conoscenze acquisite con quanto verrà appreso in insegnamenti che abbiano questi prerequisiti.

Contenuti sintetici

Vengono trattati i metodi di interrogazione di banche dati contenenti strutture di macromolecole biologiche. I metodi di analisi e confronto di strutture proteiche. I metodi di homology modelling, fold recognition e ab initio nello studio delle proprietà strutturali e funzionali delle proteine. La meccanica e la dinamica molecolare. Lo studio “in silico” dei fenomeni di riconoscimento molecolare: interazione proteina-proteina e proteina-ligando.
Vengono inoltre trattati i metodi computazionali per l’analisi, la modellizzazione e la ricostruzione in silico di network metabolici.

Programma esteso

Metodi di interrogazione di banche dati contenenti sequenze e strutture di macromolecole biologiche.
Nozioni di base riguardanti i metodi per allineare sequenze proteiche. Matrici di score.
Omologia, similarità e identità.
BLAST e FASTA. Clustal.
Accenno ai metodi sperimentali per determinare la struttura tridimensionale di macromolecole biologiche.
Principi alla base dei metodi per la predizione delle strutture tridimensionali di proteine. Homology modelling. Fold recognition.
Metodi ab initio nello studio delle proprietà strutturali e funzionali delle proteine.
Metodi per validare le strutture proteiche.
La meccanica e la dinamica molecolare.
Metodi ligand-based e receptor-based nella progettazione di nuovi farmaci.
Concetto di farmacoforo.
QSAR e metodi di machine learning.
Lo studio “in silico” dei fenomeni di riconoscimento molecolare: interazione proteina-proteina e proteina-ligando. I metodi di docking.
Metodi computazionali per l’analisi, la modellizzazione e la ricostruzione in silico di network metabolici. Metabolic Control Analysis e definizione dei coefficienti relativi. Flux Balance Analysis.
Discussione delle banche dati conteneti informazioni utili per la ricostruzione di network metabolici.

Nelle esercitazioni di laboratorio vengono utilizzati metodi computazionali e bioinformatici per:
- Progettare varianti di enzimi naturali
- Predirre la struttura di proteine mediante homology modelling
- Studiare le relazioni struttura-funzione in network metabolici

Prerequisiti

Prerequisiti. Conoscenze di base in ambito biologico, chimico e fisico

Propedeuticità. Nessuna

Modalità didattica

Lezioni frontali (32 ore ore, 4 CFU), dove vengono affrontate le basi teoriche e illustrati esempi applicativi.
Esercitazioni pratiche al calcolatore (20 ore, 2 CFU) dove vengono affrontati problemi specifici in ambito bioinformatico e computazionale.

L'insegnamento è tenuto in lingua italiana.

Materiale didattico

Slides. Disponibili sulla piattaforma e-learning dell'insegnamento.
Bibliografia. Selezione di monografie e articoli scientifici disponibili sulla piattaforma e-learning dell'insegnamento.

Libri di testo
- Stefano Pascarella, Alessandro Paiardini, Bioinformatica -Dalla sequenza alla struttura delle proteine, 2010, Zanichelli

Periodo di erogazione dell'insegnamento

Primo semestre

Modalità di verifica del profitto e valutazione

Esame orale dove vengono discussi i temi trattati a lezione, sia da un punto di vista teorico che da un punto di vista applicativo in ambito biotecnologico.

Orario di ricevimento

Ricevimento: Lunedì 15.30-17.30