UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

COURSE SYLLABUS

Structures and Molecular Interactions

2627-2-F5402Q031

Obiettivi

L'insegnamento si propone di fornire agli studenti le basi concettuali e gli strumenti applicativi della bioinformatica e della chimica computazionale 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 critiche e di giudizio
Verranno esaminati insieme agli studenti dei case study relativi alle applicazioni computazionali nell'ambito delle biotecnologie industriali.

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. I metodi computazionali basati su AI per la predizione delle proprietà strutturali e funzionali di biomolecole. La meccanica e la dinamica molecolare. Lo studio “in silico” dei fenomeni di riconoscimento molecolare: interazione proteina-proteina e proteina-ligando.
Nella parte centrale dell'insegnamento vengono illustrate le applicazioni biotecnologiche di enzimi, con particolare enfasi sui sistemi contenenti metalli di transizione in ambito energetico e di bioremediation.
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 computazionali basati su AI per la predizione delle proprietà strutturali e funzionali di biomolecole.
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.
Applicazioni biotecnologiche di enzimi, con particolare enfasi sui sistemi contenenti metalli di transizione in ambito energetico e di bioremediation.
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

24 lezioni da 2 ore svolte in presenza in modalità erogativa (didattica erogativa, DE) focalizzata sulla presentazione-illustrazione di contenuti, concetti, principi scientifici.

20 attività di esercitazione da 2 ore svolte in presenza come supporto allo studio e alla preparazione della prova d'esame svolte in modalità interattiva in presenza.

Tutte le lezioni vengono registrate e caricate sulla corrispondente pagina e-learning.
L'insegnamento viene erogato 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.

Periodo di erogazione dell'insegnamento

Primo semestre

Modalità di verifica del profitto e valutazione

Lo studente consegue i CFU del corso attraverso il superamento di una prova prova orale. Non sono previste prove in itinere.

La prova orale con votazione in trentesimi consiste in un colloquio in cui la/lo studentessa/studente dovrà rispondere in modo chiaro e con proprietà di linguaggio a domande aperte relative agli aspetti e le tematiche discusse durante le lezioni. Il voto finale terrà conto della valutazione con la seguente graduazione:
18-21: preparazione su una parte limitata degli argomenti del programma del corso, con scarsa capacità di trattazione e analisi autonoma che, nella prova orale, emergono solo a seguito dell’aiuto e delle domande del docente; capacità espositiva a tratti incerta, lessico non sempre chiaro e accurato, talvolta non corretto, con una capacità di elaborazione critica molto limitata;
22-24 preparazione su un buon numero degli argomenti del programma del corso anche se non omogenea, con una sufficiente capacità di trattazione e analisi autonoma, talvolta sollecitate dalle domande del docente; capacità espositiva sufficientemente chiara, lessico generalmente corretto, anche se talvolta non accurato o chiaro, capacità di elaborazione critica limitata;
25-27: preparazione su un numero ampio di argomenti trattati nel programma del corso, capacità di svolgere con buona autonomia l’argomentazione e l’analisi critica e capacità di applicazione delle conoscenze a casi concreti, uso di un lessico corretto e competenza nell’uso del linguaggio disciplinare;

28-30/30L: preparazione completa ed esaustiva sugli argomenti del programma d’esame, capacità di trattazione autonoma e di analisi critica degli argomenti, capacità di collegamento dei temi a casi concreti e a diversi contesti e discipline, ottima capacità di pensiero critico e autonomo, piena padronanza del lessico disciplinare, capacità espositiva rigorosa e articolata, capacità di argomentazione.

Orario di ricevimento

Ricevimento: Lunedì 15.30-17.30

Sustainable Development Goals

CONSUMO E PRODUZIONE RESPONSABILI