

<b>Attività formativa</b>	STRUTTURISTICA MOLECOLARE
<b>Modulo didattico</b>	MODULO 3: METODI COMPUTAZIONALI
<b>CFU</b>	2
<b>Ore</b>	20 (8 + 12)
<b>Tipo</b>	Lezioni frontali + esercitazioni di laboratorio
<b>Obiettivo formativo</b>	Al termine del modulo, lo studente ha una cultura di base sulle principali tecniche di strutturistica molecolare computazionale. In particolare, lo studente ha acquisito conoscenze teoriche e pratiche sul calcolo della struttura e della dinamica di macromolecole e complessi macromolecolari tramite tecniche di chimica computazionale applicata a proteine e metallo-proteine.

TEMATICA			LEZIONI		
Tema	Obiettivo	Ore		Argomenti	Durata (ore)
Introduzione.	Lo studente conosce l'organizzazione dell'insegnamento, della verifica e degli argomenti da studiare	1	1	Organizzazione delle lezioni e modalità di verifica dell'apprendimento. Introduzione agli argomenti del programma. Presentazione della strutturistica molecolare computazionale, dei suoi strumenti e dei suoi obiettivi.	1
Meccanica molecolare e campi di forza empirici.	Lo studente conosce come vengono rappresentati atomi e molecole dal punto di vista computazionale. Inoltre conosce il concetto di campo di forza empirico e di superficie di energia potenziale.	3		Richiamo ai modelli atomici e al concetto di legame chimico. Sistemi di coordinate. Meccanica molecolare.	1
			2	Rappresentazione di atomi e molecole. Superfici di energia potenziale. Campi di forza empirici. Interazioni elettrostatiche. Interazioni intermolecolari. Forze di van der Waals. Polarizzabilità. Legami a idrogeno. Minimizzazione dell'energia.	2
Dinamica molecolare (teoria).	Lo studente conosce come studiare una macromolecola di interesse biologico nel tempo.	2	3	Metodi per l'esplorazione della superficie di energia potenziale. Metodi di simulazione. Dinamica molecolare e cenni ai metodi per l'esplorazione accelerata della superficie di energia potenziale. Box di simulazione. Solvente implicito ed esplicito. Insiemi termodinamici. Termostato e pressostato.	2
Modellizzazione per omologia e riconoscimento molecolare (teoria).	Lo studente conosce come predire la struttura di una proteina e di un complesso fra una proteina e una piccola molecola, un'altra proteina o un acido nucleico.	2	4	Principi della modellizzazione per omologia. Data base di sequenze proteiche. Allineamento di sequenze. Predizione della struttura proteica. Modellizzazione dei loop. Riconoscimento molecolare (docking) macromolecola - piccola molecola e macromolecola - macromolecola. Valutazione dei modelli.	2
Esercitazione di modellizzazione per omologia e docking.	Lo studente conosce le basi del sistema operativo Linux, di un programma di visualizzazione molecolare avanzato e di un programma di modellizzazione per omologia.	4	5	Introduzione al sistema operativo Linux. Richiami all'uso del programma di visualizzazione molecolare UCSF Chimera. Applicazione del programma Modeller per la modellizzazione di una metallo proteina. Ottimizzazione, valutazione e analisi del modello ottenuto.	4
Esercitazione di riconoscimento molecolare.	Lo studente conosce le basi di due programmi per il riconoscimento molecolare.	4	6	Utilizzo del programma DOCK e riconoscimento molecolare proteina - piccola molecola. Utilizzo del programma Haddock e riconoscimento molecolare proteina - proteina. Valutazione e analisi dei risultati.	4
Esercitazione di dinamica molecolare.	Lo studente conosce le basi della dinamica molecolare.	4	7	Utilizzo del programma GROMACS. Setup di un sistema di dinamica molecolare in solvente esplicito. Minimizzazione, equilibrizzazione del solvente e dinamica di produzione. Analisi dei risultati.	4