

Attività formativa	STRUTTURISTICA MOLECOLARE
Modulo didattico	MODULO 3: METODI COMPUTAZIONALI
CFU	2
Ore	20 (8 + 12)
Tipo	Lezioni frontali + esercitazioni di laboratorio
Obiettivo formativo	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