

نام درس به فارسی: بیوانفورماتیک ساختاری

نام درس به انگلیسی: Structural Bioinformatics

تعداد واحد: ۲ واحد

تعداد ساعت: ۳۲

نوع واحد: نظری

نوع درس: اختیاری

پیشنیاز: ندارد

آموزش تکمیلی عملی: دارد □ ندارد ■ سفر علمی □ کارگاه □ آزمایشگاه □ سمینار □

اهداف کلی درس:

آشنایی دانشجویان با روش‌های تحلیل و پیشگویی ساختارهای زیست مولکول‌ها و پایگاه داده‌های مهم مرتبط با اطلاعات ساختاری

سرفصل:

- ۱- مقدمه تاریخی در مورد سیر تحول روش‌ها و مسائل مطرح در زمینه بیوانفورماتیک ساختاری
- ۲- سطح انرژی پتانسیل، روش‌های کمینه سازی انرژی یا بهینه سازی ساختارهای مولکولی
- ۳- مبانی ساختار پروتئین‌ها و اسیدهای نوکلئیک
- ۴- آشنایی با روش‌های تجربی تعیین ساختار زیست مولکول‌ها
- ۵- مروری بر مساله تاخوردگی پروتئین و مدل‌های مطرح در توصیف و تبیین این پدیده
- ۶- فرمت‌های مهم در بیان، ثبت و ذخیره سازی ساختارهای زیست مولکولی از جمله فرمت‌های PDB، XML و mmCIF
- ۷- پایگاه داده‌های مهم در ثبت و ذخیره سازی اطلاعات ساختاری پروتئین‌ها و اسیدهای نوکلئیک
- ۸- روش‌ها و الگوریتم‌های تحلیل ساختارهای زیست مولکولی از جمله مقایسه ساختار، سنجش شباهت ساختارها، برهم نهی ساختارها و طبقه بندی ساختارها
- ۹- روش‌های نسبت دهی و پیشگویی ساختارهای نوع دوم در پروتئین‌ها و اسیدهای نوکلئیک
- ۱۰- روش‌های نسبت دهی و پیشگویی دامنه‌های ساختاری پروتئین‌ها
- ۱۱- روش‌های تحلیل و پیشگویی برهمکنش پروتئین- پروتئین و پروتئین - لیگاند و شبکه‌های توصیف کننده آنها
- ۱۲- روش‌های پیشگویی ساختار پروتئین‌ها شامل روش‌های Fold recognition, homology modeling و روش‌های Ab initio
- ۱۳- رویکردهای دانش- بنیان و فیزیک- بنیان در طراحی توابع امتیازدهی و میدان‌های نیرو



روش ارزیابی:

پروژه	آزمون های نهایی	میان ترم	ارزشیابی مستمر
	آزمون های نوشتاری ۳۰	۳۰	۴۰
	عملکردی		

فهرست منابع:

- 1- Structural Bioinformatics, Jenny Gu, Philip E. Bourne, John Wiley & Sons, 2011.
- 2- Computational Methods for Protein Structure Prediction and Modeling, Ying Xu, Dong Xu, Jie Liang, John Wooley, Springer, 2007.
- 3- Protein Structure Prediction, Daisuke Kihara, Springer (Humana Press), 2014.

