

# APLICACIONS INFORMÀTIQUES

## Professors:

- Imma Ponte (iponte@uab.es)
- Josep A. Perez Pons
- Enric Querol
- Juan Cedano

## Objectius:

L'objectiu d'aquesta assignatura és que els estudiants de Bioquímica sàpiguen utilitzar les eines informàtiques per realitzar cerques d'informació als bancs de dades i per analitzar i comparar les seqüències i estructures dels àcids nucleics i de les proteïnes.

## Temari:

- 1- Introducció. Bancs de dades en Biologia Molecular. Exemples. Obtenció d'informació dels bancs de dades. Projecte Genoma.
- 2.- Anàlisi de la informació seqüencial del DNA I. Homologia de seqüències. Cerca de seqüències en els bancs de dades. Identificació de seqüències codificants i promotores.
- 3.- Anàlisi de la informació seqüencial del DNA II. Mapes de restricció (clonatge). Traducció de les seqüències a proteïna. Ensamblatge de les seqüències per la seva seqüenciació. Disseny de sondes i d'oligonucleòtids per PCR. Estructura secundària de RNA.
- 4.- Anàlisi de la informació seqüencial de proteïnes I. Homologia de proteïnes. Conceptes d'homologia i similitud. Criteris, índex de similitud, penalització, etc. Algoritmes d'alineaments per parelles de seqüències. Dot-matrix.
- 5.- Anàlisi de la informació seqüencial de proteïnes II. Algoritmes d'alineament múltiple. Arbres filogenètics. Algoritmes d'homologia remota.
- 6.- Predicció de la conformació en proteïnes. Predicció d'estructura secundària, classe estructural, hèlix transmembrana, etc. Perfils d'hidropaticitat i accessibilitat a solvent. Altres prediccions.

7.- Predicció de la funció de proteïnes a partir de la seva seqüència. Bancs de patrons estructurals/funcionals. Genòmica i Proteòmica computacionals.

8.- Estructura 3D de biomolècules. El banc d'estructures PDB. Observació i manipulació d'estructures. Estacions de treball gràfiques i aplicacions. Alineament estructural.

9.- Mètodes de modelatge de conformació de proteïnes: modelatge per homologia i modelatge per "threading". Dinàmica molecular. Simulació computacional i disseny molecular.

**Bibliografia:**

Attwood T.K. i Parry-Smith, J. 1999. Introduction to Bioinformatics Longman. UK.