

DENOMINAZIONE INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

BIOLOGIA STRUTTURALE E COMPUTAZIONALE

STRUCTURAL AND COMPUTATIONAL BIOLOGY

INFORMAZIONI INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

A.A.	2026-2027	CdS	BIOLOGIA CELLULARE, MOLECOLARE E RICERCA BIOMEDICA
Codice	8068477	Canale	Unico
CFU	6	Lingua	Italiano

DOCENTE RESPONSABILE DELL'INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

Federico Iacovelli

CODOCENTE

Modulo:

OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano	OBIETTIVI FORMATIVI: Il corso ha l'obiettivo di fornire alla studentessa e allo studente la conoscenza delle strutture di proteine e acidi nucleici, del loro rapporto struttura/funzione, delle metodiche computazionali atte a ricostruire, modellare e simulare il loro comportamento (compresi i nuovi approcci basati su intelligenza artificiale), dei workflow di analisi per l'identificazione di varianti proteiche e infine di fornire una panoramica sulle recenti implementazioni della nanotecnologia del DNA. Un ulteriore obiettivo è quello di fornire allo studente un metodo critico scientifico da poter applicare in maniera autonoma nell'affrontare nuovi problemi scientifici nel campo della biologia strutturale computazionale. CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPRENSIONE: La conoscenza e la capacità di comprensione da parte della studentessa e dello studente viene verificata durante il corso facendo applicare metodi e procedure descritte a lezione. CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPRENSIONE: La capacità di applicare conoscenza e comprensione viene verificata nella prova di esame giudicando, oltre che la conoscenza degli argomenti trattati, la capacità di applicare modelli interpretativi spiegati a lezione. AUTONOMIA DI GIUDIZIO:
----------	--

	L'autonomia di giudizio e la capacità critica viene analizzata ponendo alla studentessa e allo studente problemi scientifici che possono essere risolti tramite l'utilizzo di strumenti critici uniti alle conoscenze fornite nel corso. ABILITÀ COMUNICATIVE: L'abilità comunicativa viene giudicata analizzando la capacità di presentazione di un argomento in modo chiaro e comprensivo. CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO: La capacità di apprendimento della studentessa e dello studente viene stimolata e verificata interagendovi durante le lezioni ponendo domande e quesiti. Viene inoltre analizzata la capacità dello studente di attingere nuove informazioni a partire dalla letteratura scientifica.
English	LEARNING OUTCOMES: <i>The course aims to provide students with knowledge of protein and nucleic acid structures, their structure/function relationships, computational methods for reconstructing, modeling, and simulating their behavior (including new approaches based on artificial intelligence), omics analysis workflows for identifying protein variants, and finally, an overview of recent implementations of DNA nanotechnology. Another objective is to equip students with a critical scientific method that they can independently apply when addressing new scientific problems in the field of computational structural biology.</i> KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: <i>The student's knowledge and understanding is verified during the course asking him to apply methods and procedures described during the lessons.</i> APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: <i>The ability to apply knowledge and understanding is verified in the exam by judging, as well as the knowledge of the topics covered, the ability to apply interpretative models.</i> MAKING JUDGEMENTS: <i>Autonomy of judgment and critical capacity is analyzed by placing to the student scientific problems that can be solved by the student through the use of critical tools combined with the knowledge provided in the course.</i> COMMUNICATION SKILLS: <i>Communication skills are judged by analyzing the ability to present a topic clearly and comprehensively.</i> LEARNING SKILLS:

	<i>The student's learning ability is stimulated and verified by making the student interact during the explanations by asking questions. The student's ability to obtain new information by reading the scientific literature is also analyzed.</i>
--	---

PREREQUISITI

Italiano	Conoscenze base di biochimica, chimica, matematica, biologia molecolare e bioinformatica
<i>English</i>	<i>Basic knowledge of biochemistry, chemistry, maths, molecular biology and bioinformatics</i>

PROGRAMMA E CRONOPROGRAMMA

Italiano	Il corso di Biologia Strutturale Computazionale offre un viaggio nel mondo microscopico delle molecole biologiche. Partendo dai fondamenti della biologia strutturale, si comprenderanno i livelli di organizzazione di proteine e acidi nucleici, le loro interazioni e i meccanismi di riconoscimento molecolare. Si acquisirà dimestichezza con potenti strumenti di visualizzazione 3D, permettendo di esplorare la struttura tridimensionale di queste molecole e di comprenderne il funzionamento. Il percorso formativo prosegue con l'approfondimento dei metodi sperimentali e computazionali per la predizione e l'analisi della struttura di proteine e acidi nucleici, inclusa l'innovativa tecnologia AlphaFold basata sull'intelligenza artificiale. Si analizzeranno dati genomici e trascrittomici per identificare mutazioni e valutarne l'impatto sulla struttura e funzione delle proteine. Il corso culminerà con l'applicazione della dinamica molecolare per simulare il movimento e le interazioni delle molecole biologiche, approfondendo la comprensione dei meccanismi cellulari. Si esploreranno inoltre le prospettive della nanotecnologia del DNA, aprendo una finestra sulle future applicazioni in medicina, biotecnologia e scienza dei materiali. Programma completo: Modulo 1 • (12h): Richiami di biologia strutturale. Esempi di sistemi di riconoscimento molecolare: anticorpo-antigene, enzima-substrato, proteina-DNA (principali motivi di interazione con il DNA). • (2h): Caratteristiche strutturali di proteine di membrana e sistemi di predizione associati. • (2h): Metodi sperimentali per la determinazione della struttura delle proteine. Banche dati strutturali. Il file PDB. • (4h): I programmi di grafica molecolare Chimera, PyMOL e VMD. Esercitazioni pratiche al calcolatore.
-----------------	---

	Modulo 2 • (2h): Metodi computazionali per la predizione delle strutture delle proteine: Homology modelling, threading, ab-initio. • (4h): Metodi computazionali per la predizione delle strutture delle proteine: basati su IA. • (2h): Metodi computazionali per la predizione della struttura degli acidi nucleici. Modulo 3 • (2h): Analisi di dati di genomica e trascrittomica per l'identificazione di mutazioni proteiche. • (2h): Mapping e modellazione di mutazioni sulle strutture 3D. Il campo di forze FoldX. • (6h): Metodi computazionali per lo studio di interazioni proteina-proteina, proteina-ligando, DNA-ligando. Esercitazioni pratiche al computer. Modulo 4 • (2h): Dinamica molecolare classica per lo studio dei moti delle macromolecole biologiche (Parte I). • (2h): Dinamica molecolare classica per lo studio dei moti delle macromolecole biologiche (Parte II). • (2h): Dinamica molecolare applicata allo studio di sistemi proteina-DNA, proteina-DNA-ligando e aptamero a DNA-ligando. • (2h): Introduzione alla nanotecnologia del DNA.
English	<i>The Computational Structural Biology course offers a journey into the microscopic world of biological molecules. Starting from the fundamentals of structural biology, we will understand the levels of organization of proteins and nucleic acids, their interactions and molecular recognition mechanisms. You will become familiar with powerful 3D visualization tools, allowing you to explore the three-dimensional structure of these molecules and understand how they work.</i> <i>The training path continues with the in-depth study of experimental and computational methods for predicting and analyzing the structure of proteins and nucleic acids, including the innovative AlphaFold technology based on artificial intelligence. Genomic and transcriptomic data will be analyzed to identify mutations and evaluate their impact on protein structure and function.</i> <i>The course will culminate with the application of molecular dynamics to simulate the movement and interactions of biological molecules, deepening the understanding of cellular mechanisms. The prospects of DNA nanotechnology will also be explored, opening a window on future applications in medicine, biotechnology and materials science.</i>

	<i>Full program:</i> Module 1 • (12h): Review of structural biology. Examples of molecular recognition systems: antibody-antigen, enzyme-substrate, protein-DNA (main DNA interaction motifs). • (2h): Structural features of membrane proteins and associated prediction systems. • (2h): Experimental methods for protein structure determination. Structural databases. The PDB file format. • (4h): Molecular graphics software: Chimera, PyMOL, and VMD. Practical computer-based exercises. Module 2 • (2h): Computational methods for protein structure prediction: Homology modeling, threading, <i>ab initio</i>. • (4h): Computational methods for protein structure prediction: AI-based methods. • (2h): Computational methods for nucleic acid structure prediction. Module 3 • (2h): Analysis of genomics and transcriptomics data for the identification of protein mutations. • (2h): Mapping and modeling of mutations on 3D structures. The FoldX force field. • (6h): Computational methods for studying protein-protein, protein-ligand, and DNA-ligand interactions. Practical computer-based exercises. Module 4 • (2h): Classical molecular dynamics for studying the motions of biological macromolecules (Part I). • (2h): Classical molecular dynamics for studying the motions of biological macromolecules (Part II). • (2h): Molecular dynamics applied to the study of protein-DNA, protein-DNA-ligand, and DNA aptamer-ligand systems. • (2h): Introduction to DNA nanotechnology.
--	--

TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA DI RIFERIMENTO

Italiano	Agli studenti viene fornito materiale didattico come immagini e testo trattato a lezione e articoli recenti di letteratura scientifica. Il materiale è disponibile sulla classe Teams del corso previa richiesta di iscrizione.
English	Students are provided with learning materials, including images and text covered during lectures, as well as recent scientific literature articles. The materials can be accessed on the course's Microsoft Teams platform upon enrollment request.

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI SVOLGIMENTO E METODI DIDATTICI ADOTTATI

☒ In presenza ☐ A distanza

Italiano	La modalità principalmente adottata è la lezione frontale alla quale lo studente è stimolato a partecipare attraverso domande e quesiti. Il programma segue un percorso logico mirato a dimostrare come la conoscenza di una serie di eventi a livello atomistico e microscopico possano essere utilizzati per la comprensione di un evento macroscopico.
English	<i>The mainly adopted modality is the frontal lesson in which the student is stimulated to participate through questions. The program follows a logical path aimed at demonstrating how the knowledge of a series of events at the atomistic and microscopic level can be used for the understanding of a macroscopic event..</i>

MODALITÀ DI FREQUENZA

☐ frequenza obbligatoria ☒ frequenza facoltativa

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI FREQUENZA

Italiano	Frequenza non obbligatoria, ma fortemente consigliat
English	<i>Course attendance not required,, but strongly recommended.</i>

MODALITÀ DI VALUTAZIONE

☐ Prova scritta ☒ Prova orale ☐ Prova di laboratorio ☐ Prova pratica
☐ Valutazione in itinere ☐ Valutazione di progetto ☐ Valutazione di tirocinio

COMPOSIZIONE DELLA COMMISSIONE VALUTATRICE

Federico Iacovelli, Mattia Falconi

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ E DEI CRITERI DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano	La modalità di verifica prevede un esame orale, composto da 3 domande principali, in cui la studentessa o lo studente deve mostrare capacità sintetiche, di chiara esposizione degli argomenti trattati e conoscenza delle tematiche studiate, utilizzando una terminologia adeguata. Per superare l'esame, è richiesto un voto minimo di 18/30. La valutazione sarà effettuata secondo la seguente gradazione di voti: Non idoneo, importanti carenze e/o inaccurately nella conoscenza e comprensione degli argomenti, limitate capacità di analisi e sintesi, frequenti generalizzazioni.
----------	---

	18-21, lo studente ha acquisito i concetti di base della disciplina, modo di esprimersi e linguaggio sufficientemente corretti e appropriati. 22-25, lo studente ha acquisito in maniera approfondita i concetti di base della disciplina, ed è adeguatamente in grado di effettuare i collegamenti fra le varie materie. Presenta linearità nella strutturazione del discorso. Il linguaggio è appropriato e corretto. 26-29, lo studente possiede un bagaglio di conoscenze completo e ben strutturato. È in grado di applicare e rielaborare in maniera autonoma, senza alcun errore, le conoscenze acquisite. Evidenzia ricchezza di riferimenti e capacità logico-analitiche con un linguaggio fluido, appropriato e vario. 30 e 30 e lode, lo studente possiede un bagaglio di conoscenze completo e approfondito. Sa applicare conoscenze a casi e problemi complessi ed estenderle a situazioni nuove. I riferimenti culturali sono ricchi e aggiornati. Si esprime con brillantezza e perfetta proprietà di linguaggio.
English	<i>The exam consists of an oral interview aimed at verifying the level of knowledge of the topics covered in class. The discussion begins with a question on topics discussed in class regarding crystalline structures and lattice defects. Two more questions are then proposed on further topics.</i> <i>To pass the exam, a grade of not less than 18/30 must be obtained; more specifically, the vote is determined as follows:</i> <i>Not suitable, significant deficiencies and/or inaccuracies in knowledge and understanding of the topics, limited analysis and synthesis skills, frequent generalizations.</i> <i>18-21, the student has acquired the basic concepts of the discipline, manner of expression and language that is sufficiently correct and appropriate.</i> <i>22-25, the student has acquired in depth the basic concepts of the discipline, and is adequately able to make the connections between the various subjects. He/She presents linearity in the structuring of speech. The language is appropriate and correct.</i> <i>26-29, the student has a complete and well-structured set of knowledge. He/She is able to autonomously apply and re-elaborate the acquired knowledge without any errors. Highlights a wealth of references and logical-analytical skills with a fluid, appropriate and varied language.</i> <i>30 and 30 cum laude, the student has a complete and in-depth knowledge base. He/She can apply knowledge to complex cases and problems and extend it to new situations. The cultural references are rich and up-to-date. He/She expresses him/herself with brilliance and perfect language properties.</i>