

## Structurele bio-informatica en analyse (C003526)

**Cursusomvang** (nominale waarden; effectieve waarden kunnen verschillen per opleiding)

**Studiepunten 3.0**

**Studietijd 80 u**

**Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2024-2025**

A (semester 1)

Engels

Gent

hoorcollege

werkcollege

**Lesgevers in academiejaar 2024-2025**

Savvides, Savvas

WE10

Verantwoordelijk lesgever

Mehdipour, Ahmadreza

TW17

Medelesgever

**Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2024-2025**

**stptn**

**aanbodsessie**

Educatieve Master of Science in de wetenschappen en technologie (afstudeerrichting biochemie en biotechnologie)

3

A

Master of Science in Bioinformatics (afstudeerrichting Systems Biology)

3

A

Master of Science in Biochemistry and Biotechnology

3

A

Uitwisselingsprogramma biochemie en biotechnologie (niveau master)

3

A

**Onderwijstalen**

Engels

**Trefwoorden**

Secundaire structuurbepaling, structuurvoorspelling, hybride methoden in de structurele biologie, structuur validatie, moleculaire visualisatie, structuurdatabanken, moleculaire docking, force fields, moleculaire dynamica, structurele bioinformatica.

**Situering**

Deze cursus beoogt een overzicht te geven van het domein van de structurele bio-informatica. Dit is de bio-informatica die zich meer bepaald bezighoudt met de structuur en functie van proteïnen. Dit opleidingsonderdeel sluit aan bij volgende opleidingscompetenties: Ma.WE.BB.1.2, Ma.WE.BB.1.3, Ma.WE.BB.2.5, Ma.WE.BB.2.6

**Inhoud**

- Aligneringen van eiwitsequenties, homologie, classificatie, eiwitfamilies
- Structurele superponering en vergelijking.
- Voorspelling van de drie-dimensionele eiwitstructuur
  - Homologie modelering
  - Fold herkenning
  - Ab initio
- Kwaliteit van eiwitstructuren
  - Kwaliteitsindicatoren van macromoleculaire structuren ontrafeld via de X-stralenkristallografie, electronenmicroscopie, NMR etc)
  - Kwaliteitscontrole van structuren en fouten in eiwitstructuren
- Voorspelling van de secundaire eiwitstructuur
  - Secundaire structuurvoorkeuren van aminozuren
  - Eerste, tweede en derde generatie algoritmen
  - Voorspellen van transmembranaire helices
- Integratieve methoden in de structurele biologie
- Structuurdatabanken
- Analysemethoden van eiwit-ligand interacties, moleculaire docking en virtual screening

- Beginselen in moleculaire 'docking' and moleculaire dynamica.

### **Begincompetenties**

Basiskennis moleculaire biologie

Basiskennis bio-informatica

Basiskennis structurele biologie is een pluspunt

Inschrijven voor dit onderdeel is enkel mogelijk mits gelijktijdige inschrijving voor het opleidingsonderdeel, 'Structuur en functie van biologische macromoleculen', of wanneer dit opleidingsonderdeel reeds met succes gevolgd werd.

### **Eindcompetenties**

- 1 Zichzelf een beeld kunnen vormen van de grote onderzoeksdomeinen in de structurele bioinformatica en de problemen die zich daarbij stellen.
- 2 Inzicht hebben in de concepten die de verschillende algoritmen in de structurele bioinformatica hanteren.
- 3 Identificeren en toepassen van gepaste online tools, software, en benaderingen om eiwitstructuren en sequenties te analyseren ter complementatie van onderzoek in de biochemie, biotechnologie, structurele biologie etc.

### **Creditcontractvoorwaarde**

Toelating tot dit opleidingsonderdeel via creditcontract is mogelijk mits gunstige beoordeling van de competenties

### **Examencontractvoorwaarde**

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

### **Didactische werkvormen**

Werkcollege, Hoorcollege

### **Studiemateriaal**

Type: Slides

Naam: Lesmateriaal'

Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding

Optioneel: nee

Bijkomende info: Lesmaterialen via UFORA. Relevante websites, servers, software en overzichtsartikelen Lesopnames

### **Referenties**

### **Vakinhoudelijke studiebegeleiding**

Weekly office-hour

### **Evaluatiemomenten**

niet-periodegebonden evaluatie

### **Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode**

### **Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode**

### **Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie**

Werkstuk

### **Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie**

Examen in de tweede examenperiode is mogelijk

### **Toelichtingen bij de evaluatievormen**

The exam will assume a 'take-home' format.

The exam will be completed independently by each student against a specified deadline and will be submitted online according to specified instructions and format.

### **Eindscoreberekening**

Evaluation methods: Assignment 100%