

C3211 Aplikovaná bioinformatika

Jaro 2025

Peptidy a proteiny: teoretický úvod (proteinogenní aminokyseliny, nestandardní proteinogenní aminokyseliny), D-aminokyseliny, D-peptidy, D-proteiny, antimikrobiální peptidy, design peptidů, hydrofobní moment, "helical wheel", Jak pracovat s proteiny?, teplota tání (T_m), predikce teploty tání, predikce termostability, stabilizující mutace, databáze mutantů, agregace proteinů (in vitro, in vivo), predikce agregace (ze sekvence, ze struktury), predikce prionů, agregace a neurodegenerativní choroby. **(DSF, AUC, DLS)**

Sekundární struktura a funkce proteinů: teoretický úvod (využití sekundární struktury proteinů pro ověření správného sbalování proteinů, CD spektroskopie, predikce funkce proteinů, databáze strukturních a funkčních motivů), predikce sekundární struktury proteinů, predikce CD spektra proteinů, predikce funkce proteinů pomocí sekvenčního přiložení, identifikace a porovnání aktivního místa proteinů, význam aminokyselinových záměn v aktivním místě, identifikace strukturních a funkčních motivů v sekvencích. **(CD)**

Terciární struktura a oligomerizace proteinů: teoretický úvod (3D struktura proteinů, strukturní databáze, určování struktury proteinů, rozdíly mezi krystalografií a NMR, teorie predikce 3D struktury, význam oligomerizace proteinů, metody určování oligomerizace proteinů), vizualizace 3D struktury proteinu, typy zobrazení, porovnání homologních proteinů, analýza aktivního místa proteinu, ukázka predikčních programů, validace struktury, predikce oligomerního stavu proteinů, analýza repetice. **(NMR, Cryo-EM, robotika)**

Příprava rekombinantních proteinů: teoretický úvod (původ proteinů, hostitelský organismus), toxické proteiny, význam disulfidických můstků, inkluzní tělíska, predikce rozpustnosti proteinů, využití kodonů, analýza a optimalizace kodonů, syntetický gen, problém intronů, glykosylace, predikce glykosylace a dalších posttranslačních modifikací. **(Molekulárně-biologická laboratoř)**

Doplněno o exkurze do laboratoří – ukázky přístrojů a experimentálních technik, srovnání s predikčními metodami.

Podmínky ukončení: **Účast na cvičeních** (dvě možné absence bez omluvy, ostatní nutné omluvit).
Vypracované domácí úkoly ze všech cvičení (i při absenci, omluvené či neomluvené).
Kolokvium – rozprava o (nejen) domácích úkolech.