

Corso di formazione gratuito in

# Meccanica delle Bio-Molecole per le neuroscienze e applicazioni biomediche

IBIO-01 Bio-engineering; ING-IND/34

Docente:

**Dott. Ing. Marcello Miceli**

Researcher at SUPSI, University of Applied Sciences of Southern Switzerland

## PROGRAMMA

Torre Biologica (Via Santa Sofia 97, Catania)

• **23 Giugno ore 10-12 aula 1**

Introduzione al corso e alle modalità d'esame. Fondamenti della biofisica computazionale: cenni di probabilità e statistica

• **24 Giugno ore 10-12 aula 1**

Introduzione ai fondamenti della biofisica computazionale; esercizi in aula

• **25 Giugno ore 10-13 aula  
multimediale nord**

Introduzione a linux e bash con laboratorio

• **30 Giugno ore 10-12 aula 1**

Molecular mechanics : Forcefield e Parametri di Legame

• **1 Luglio ore 10-12 aula 1**

Molecular mechanics: Parametri di non legame e modelling del solvente esplicito

• **2 Luglio ore 10-13 aula  
multimediale nord**

Rappresentazione e predizione di struttura tridimensionale di proteine e database : PDB, Alphafold2,Alphafold3. Gromacs 1: Parametrizzazione di una biomolecola, pdb2gmx, editconf, solvate, genion

• **7 Luglio ore 10-12 aula 1**

Dinamica Molecolare: Minimizzazione dell'energia

• **8 Luglio ore 10-12 aula 1**

Dinamica Molecolare: Integratori, termostati, barostati

• **9 Luglio ore 10-13 aula  
multimediale nord**

Dinamica Molecolare: Accenni di campionamento avanzato. Gromacs 2 : Minimizzazione e equilibrizzazione

• **14 Luglio ore 10-12 aula  
multimediale nord**

Gromacs 3: Analisi

• **15 Luglio ore 10-12 aula 1**

Docking Molecolare: Physics based, AI based

• **16 Luglio ore 10-13  
aula multimediale nord**

Intro Chimera X. Molecular Docking.

Per iscrizioni rivolgersi alla Prof.ssa Platania [chiara.platania@unict.it](mailto:chiara.platania@unict.it)

Posti disponibili : 40