

## **TIROCINIO BIOFISICA COMPUTAZIONALE (3 CFU per L.M. fino a.a. 2013-2014)**

**Responsabili:** Attilio V. Vargiu, P. Ruggerone

La durata del tirocinio è di 36 ore con orario da stabilire con lo studente.

Nella fase iniziale del tirocinio (4-6 ore) lo studente acquisirà familiarità, sotto la guida di uno dei docenti responsabili, con il programma di visualizzazione e analisi VMD (Visual Molecular Dynamics). Si tratta di un programma ampiamente usato in ambito biofisico per visualizzare strutture di sistemi biologici, sia ottenute sperimentalmente sia estratte da simulazioni di dinamica molecolare. Oltre alla visualizzazione, VMD permette di analizzare in dettaglio molte proprietà di tali strutture. Programmi di analisi sono presenti in rete, ma possono essere sviluppati dall'utente in TCL o in Python. Sarà proprio alla conoscenza di tali programmi e linguaggi che sarà dedicato il secondo periodo del tirocinio (8 ore).

Successivamente, nel rimanente periodo del tirocinio, lo studente dovrà sviluppare uno o più programmi di analisi legati alle attività di ricerca dei responsabili del tirocinio. Un esempio potrebbe essere lo sviluppo di un programma di analisi in grado di classificare le molecole del solvente secondo i loro tempi di residenza nelle vicinanze di domini d'interesse delle proteine. Questa rappresenta un'informazione molto importante per gli studi d'interazione fra ligandi e proteine.

Al termine del tirocinio gli studenti dovranno elaborare una relazione sull'attività svolta, che discuteranno durante il colloquio conclusivo. In seguito i docenti responsabili rilasceranno un attestato sul tirocinio svolto.