

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka)	Kamieninis padalinys	Šakinis padalinys
Baltymų struktūrinė bioinformatika	Biochemija 04P Biologija 01B	Gyvybės mokslų centras	Biotechnologijos institutas
8 kreditai (240 val.)	Informatika 09P		
Studijų būdas	Valandų skaičius	Studijų būdas	Valandų skaičius
Paskaitos	0	konsultacijos	2
Individualus	238	seminarai	0

Dalyko anotacija

Kurso tikslas – pagilinti esamas ir įgyti naujų žinių apie kompiuterinių metodų taikymą baltymų sekų, struktūrų, sąveikų ir funkcijos analizei bei struktūros ir funkcijos prognozavimui. Pagrindiniai biologinių sekų ir struktūrų duomenų bankai. Amino rūgščių tarpusavio panašumo samprata. Baltymų homologijos samprata. Giminingų baltymų paieška. Informacijos apie baltymų sekų šeimą apibendrinimas naudojant sekų profilius ir paslėptus Markovo modelius. Antrinė ir tretinė baltymų struktūra. Baltymo sekos - molekulės erdvinės struktūros - baltymo biologinės funkcijos sąryšio tyrimai pasitelkiant *in silico* metodus. Baltymų tarpusavio sąveikos ir jų kompleksai. Eksperimentinių erdvinė struktūrų duomenų bazė – PDB. Baltymų ir jų kompleksų struktūrų prognozavimas kompiuteriniais metodais.

Pagrindiniai šaltiniai

A.Lesk. Introduction to Bioinformatics, 4th edition // Oxford University Press, 2014, ISBN-13 978-0199651566.
 O.S.D.Gopakumar. Bioinformatics: Sequence and Structural Analysis // Alpha Science International Ltd, 2014, ISBN 1-84265-490-X.
 Homology modeling : methods and protocols / edited by Andrew J.W. Orry, Ruben Abagyan. Volume 857, 2012 // Humana Press, ISBN: 978-1-61779-587-9 (Print) 978-1-61779-588-6 (Online)
 D.W.Mount. Bioinformatics. Sequence and genome analysis // New York, CSHL press, 2004, ISBN 978-087969712-9.
 W.J.Ewens, G.Grant. Statistical Methods in Bioinformatics: An Introduction // Springer, 2005, ISBN 978-0-387-26648-0.
 Naujausių bioinformatikos metodų straipsniai – nuolatos atnaujinamas sąrašas

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Česlovas Venclovas	Dr.		Olechnovič K, Venclovas Č. The CAD-score web server: contact area-based comparison of structures and interfaces of proteins, nucleic acids and their complexes. <i>Nucleic Acids Res</i> 2014; 42(Web Server issue):W259-63. Kazlauskas D, Krupovic M, Venclovas Č. The logic of DNA replication in double-stranded DNA viruses: insights from global analysis of viral genomes, <i>Nucleic Acids Res.</i> 2016; 44:4551-4564. Olechnovič, K., Venclovas, Č. (2017) VoroMQA: Assessment of protein structure quality using interatomic contact areas, <i>Proteins</i> 85:1131-1145.
Albertas Timinskas	Dr.		Timinskas K, Balvociute M, Timinskas A , Venclovas C. Comprehensive analysis of DNA polymerase III α subunits and their homologs in bacterial genomes. <i>Nucleic Acids Res</i> 2014; 42(3):1393-413. Dapkunas J, Timinskas A , Olechnovič K, Margelevičius M, Dičiūnas R, Venclovas Č. <i>Bioinformatics.</i> 2017; 33(6):935-937.

Patvirtinta Gyvybės mokslų centro Tarybos posėdyje 2017-06-30, protokolo Nr. 600000-TP-10

Tarybos pirmininkas prof. V. Šikšnys