



## Delavnica:

## De novo načrtovanje proteinov z uporabo Rosetta in AlphaFold 2

**Četrtek 23. 6. 2022, od 9:00 do 17:00**

Velika predavalnica, Kemijski Inštitut, Hajdrihova 19, Ljubljana, Slovenija

Dizajn proteinov ima velik tehnološki pomen, saj lahko reši marsikatere biomedicinsko pomembne izzive. Primeri načrtovanih proteinov vključujejo nove terapevtske učinkovine (inhibitorji COVID-19, cepiva proti COVID-19, zaviralci gripe), nanomateriale (kletke, plasti, vlakna) in senzorje.

Delavnica bo zasnovana kot hitri tečaj načrtovanja proteinov, ki bo predstavila, kaj vse je možno s trenutno tehnologijo. Udeleženci se bodo naučili, kako iz nič **zgraditi protein iz štirih alfa vijačnic** (tj. samo z uporabo matematike). Na koncu delavnice bodo pridobili zaporedje za protein, ki se zvije v načrtovano obliko. Na delavnici bodo predstavljene osnove programskega paketa Rosetta, parametričnega oblikovanja ogrodja, oblikovanja zank in oblikovanja stranskih verig. Predstavljene bodo tudi osnove Alphafold 2 in njegove uporabe.

Delavnico bo vodil dr. Ajasja Ljubetič, štipendist Marie Skłodowska-Curie, ki je postdoktorsko izobraževanje opravljal v laboratoriju Davida Bakerja (Seattle, USA). Laboratorij spada med najbolj znane laboratorije za načrtovanje proteinov.

začetek	trajanje	konec	program
09:00	1:30	10:30	Uvod v načrtovanje proteinov, PyRosetta in Rosetta XML
10:30	0:30	11:00	Odmor za kavo
11:00	1:30	12:30	Parametrično oblikovanje ogrodja
12:30	1:00	13:30	Kosilo
13:30	1:30	15:00	Selektorji ostankov, oblikovanje zank, načrtovanje v plasteh, minimizacija
15:00	0:30	15:30	Odmor za kavo
15:30	1:30	17:00	Načrtovanje stranskih verig, pakiranje rotamerjev, filtriranje z AlphaFold2

**Komu je delavnica namenjena:** diplomskim, magistrskim in doktorskim študentom, kot tudi podoktorskim raziskovalcem in mladim znanstvenikom, **ki jih zanima načrtovanje proteinov**. Udeleženci morajo biti seznanjeni z osnovami strukture proteinov (kaj je alfa vijačnica, kaj je proteinski skelet in kaj so stranske verige). Priporočene so tudi osnove programskega jezika Python (kako uvoziti module in izvršiti ukaze).

**Pogoji za udeležbo:** udeleženci morajo prinesiti **lastni prenosni računalnik**. Za izračune bo uporabljeno okolje Google Colab, zato je potreben le spletni brskalnik. Udeleženci bodo potrebovali Google uporabniški račun.

**Prijava:** prijave so brezplačne, sprejemamo jih do **13. 6. 2022**. V prijavo so vključeni odmori za kavo, kosilo pa ne bo organizirano v okviru delavnice. Udeležba bo omejena na 25 udeležencev, ki bodo o sprejemu na delavnico obveščeni po elektronski pošti do 15. 6. 2022. Prijavite se lahko preko spodnje povezave:

<https://tinyurl.com/RosettaCrashCourse>

**Organizatorji:** Ajasja Ljubetič, Eva Rajh, Tadej Satler  
Za več informacij kontaktirajte: [ajasja.ljubetic@ki.si](mailto:ajasja.ljubetic@ki.si)

