Sylabus przedmiotu w Szkole Doktorskiej

Nauk Medycznych i Nauk o Zdrowiu

dotyczy: cyklu kształcenia od 2019/2020

|  |  |
| --- | --- |
| Nazwa przedmiotu | **Bazy bioinformatyczne w naukach farmaceutycznych** |
| Nazwa jednostki prowadzącejprzedmiot | Szkoła Doktorska Nauk Medycznych i Nauk o Zdrowiu  |
| Język przedmiotu | polski |
| Dziedzina  | Nauki Medyczne i Nauki o Zdrowiu  |
| Dyscyplina | Nauki Farmaceutyczne  |
| Cel nauczania | Nabycie wiedzy oraz umiejętności korzystania ze specjalistycznych baz bioinformatycznych, w tym baz proteomicznych, chemicznych, baz skriningu leków oraz baz patentowych, dostarczających informacji i narzędzi przydatnych w rozwiązywaniu szerokiego spektrum problemów badawczych z obszarów nauk faramaceutycznych, istotnych dla poszczególnych etapów procesu odkrywania, rozwoju i wdrażania leku.  |
| Efekty uczenia się dla przedmiotuujęte w kategoriach: wiedzy, umiejętności i kompetencji społecznych | **W zakresie wiedzy:** * zna i rozumie metodologię badań naukowych obejmującą podstawy teoretyczne oraz zagadnienia ogólne dotyczące bioinformatyki i powiązanych z nią nowczesnych gałęzi naukowych wspomagających różnorodne obszary nauk farmaceutycznych W\_1 P8S\_WG

**W zakresie umiejętności:*** umie formułować nowe rozwiązania problemów w ramach zastanych i zmodyfikowanych paradygmatów metodologicznych z wykorzystaniem baz i narzędzi bioinformatycznych U\_1 P8S\_UW
* twórczo stosować i rozwijać metody, techniki i narzędzia badawcze, właściwe dla prowadzonych badań w oparciu o zasoby baz danych i narzęzdzia bioinformatyczne udostępniane w internecie U\_1 P8S\_UW

**W zakresie kompetencji społecznych:*** podtrzymania i rozwijania etosu środowisk badawczych i twórczych, w tym prowadzenia badań w sposób niezależny, z uwzględnieniem istniejących ograniczeń, respektowania zasady publicznej własności wyników badań naukowych z uwzględnieniem zasad ochrony własności intelektualnej K\_7 P8S\_KR
 |
| Typ przedmiotu(obowiązkowy/fakultatywny) |  Fakultatywny |
| Semestr/rok |  III/II (opcjonalnie V/III)  |
| Imię nazwisko osoby/osóbprowadzącej/prowadzących przedmiot | dr hab. Jadwiga Handzlik, prof. UJ ,dr hab. Dorota Łażewska  |
| Imię i nazwisko osoby/osóbegzaminującej/egzaminujących bądź udzielającej zaliczenia, w przypadku gdy nie jest to osoba prowadząca dany przedmiot |   |
| Sposób realizacji | Wykłady – 5 godz.Seminarium – 10 godz.Praca własna – 15 godz. |
| Wymagania wstępne i dodatkowe | Znajomość języka angielskiego i umiejętność obsługi podstawowych oprogramowań komputera PC . |
| Liczba punktów ECTS przypisanaprzedmiotowi | 1 |
| Bilans punktów ECTS | Wykłady i Seminaria: 15 godz.Praca własna (przygotowanie prezentacji): 15 godz.Łącznie: 1 ECTS |
| Stosowane metody dydaktyczne | Wykład informacyjny, prelekcja, warsztaty komputerowe, seminarium, dyskusja w grupach, prezentacja multimedialna. |
| Metody sprawdzania i ocenyefektów uczenia się uzyskanych przez doktorantów | 1. Obserwacja aktywności na zajęciach
2. Test multimedialny sprawdzający umiejętności korzystania z poznanych baz internetowych.
 |
| Forma i warunki zaliczeniaprzedmiotu, w tym zasady dopuszczenia do egzaminu, zaliczenia, a także forma i warunki zaliczenia przedmiotu   | Zaliczenie z oceną. 1. Ocena aktywności na zajęciach dokonana przez prowadzącego.
2. Ocena z testu sprawdzającego.

Zastosowanie ma skala ocen określona w Regulaminie studiów doktoranckich. |
| Treści przedmiotu | 1. Bioinformatyka – wprowadzenie. Podstawy molekularnego podejścia do rozwiązywania zagadnienień biologicznych. Bioinformatyka jako narzędzie w rozwiązywaniu problemów biologicznych. Charakterystyka gałęzi nauk związanych z bioinformatyką: genomika i proteomika, modelowanie molekularne. Human Genom Project – podstawowe założenia
2. Główne operacje na sekwencjach (alignment, poszukiwanie sekwencji podobnych)
3. Przegląd ważniejszych baz i serwisów bioinformatycznych (PDB, NCBI, SwissProt, EMBL-EBI, Enzyme, KEGG, UCSC).
4. Zastosowanie baz bioinformatycznych w skriningu farmakologicznym (Zajecia warsztatowe I). Charakterystyka białek docelowych z wykorzystaniem serwisów bioinformatycznych. Badanie zidentyfikowanych doświadczalnie struktur białek, ważnych z punktu widzenia projektowania leków (wybrane białka z grupy receptorów GPCR i jonotropowych oraz białek enzymatycznych). Wyszukiwanie informacji dotyczących struktury przestrzennej - baza PDB.
 |
|  | 1. Znajdowanie sekwencji wybranych białek docelowych (zajęcia warsztatowe) (serwis Expasy/ baza SwissProt).Sekwencje nukleotydowe i aminokwasowe (EMBL, GenBank). Porównywanie sekwencji białek zidentyfikowanych doświadczalnie z wygenerowanymi na podstawie sekwencji nukleotydowych (alignment z wykorzystaniem serwisu LALIGN). Znajdowanie białek podobnych na podstawie sekwencji z wykorzystaniem algorytmu BLAST.
2. Bioinformatyka – wprowadzenie. Podstawy molekularnego podejścia do rozwiązywania zagadnienień biologicznych. Bioinformatyka jako narzędzie w rozwiązywaniu problemów biologicznych. Charakterystyka gałęzi nauk związanych z bioinformatyką: genomika i proteomika, modelowanie molekularne. Human Genom Project – podstawowe założenia
3. Główne operacje na sekwencjach (alignment, poszukiwanie sekwencji podobnych)
4. Przegląd ważniejszych baz i serwisów bioinformatycznych (PDB, NCBI, SwissProt, EMBL-EBI, Enzyme, KEGG, UCSC).
5. Zastosowanie baz bioinformatycznych w skriningu farmakologicznym (Zajecia warsztatowe I). Charakterystyka białek docelowych z wykorzystaniem serwisów bioinformatycznych. Badanie zidentyfikowanych doświadczalnie struktur białek, ważnych z punktu widzenia projektowania leków (wybrane białka z grupy receptorów GPCR i jonotropowych oraz białek enzymatycznych). Wyszukiwanie informacji dotyczących struktury przestrzennej - baza PDB.
6. Znajdowanie sekwencji wybranych białek docelowych (zajęcia warsztatowe) (serwis Expasy/ baza SwissProt).Sekwencje nukleotydowe i aminokwasowe (EMBL, GenBank). Porównywanie sekwencji białek zidentyfikowanych doświadczalnie z wygenerowanymi na podstawie sekwencji nukleotydowych (alignment z wykorzystaniem serwisu LALIGN). Znajdowanie białek podobnych na podstawie sekwencji z wykorzystaniem algorytmu BLAST.
7. Podstawowe bazy bioinformatyczne w skriningu wirtualnym ADMET (Molinspiration, OSIRIS, Chemaxon, SwissADME, pkCSM)
8. Zastosowanie baz i serwisów bioinformatycznych w skriningu ADMET. (Zajęcia warsztatowe II) Symulacja właściwości farmakokinetycznych i parametrów ADMET z wykorzystaniem serwisów internetowych (Molinspiration, OSIRIS, Chemaxon, SwissADME, pkCSM
9. Bazą KEGG. Korzystanie z map reprezentujących wiedzę z zakresu oddziaływań międzycząsteczkowych oraz szereg reakcji dotyczących metabolizmu z uwzględnieniem ścieżek metabolicznych (KEGG PATHWAY, KEGG atlas, KEGG LIGAND)
10. Zastosowanie baz i serwisów bioinformatycznych w skriningu ADMET. (Zajęcia warsztatowe II) Symulacja właściwości farmakokinetycznych i parametrów ADMET z wykorzystaniem serwisów internetowych (Molinspiration, OSIRIS, Chemaxon, SwissADME, pkCSM
 |
|  | 1. Bazą KEGG. Korzystanie z map reprezentujących wiedzę z zakresu oddziaływań międzycząsteczkowych oraz szereg reakcji dotyczących metabolizmu z uwzględnieniem ścieżek metabolicznych (KEGG PATHWAY, KEGG atlas, KEGG LIGAND)
2. Charakterystyka wybranych enzymów w oparciu o zasoby bazy ENZYME.
3. Bazy bioinformatyczne w projektowaniu struktury nowego leku. Bazy chemiczne (CHEMBL, ChemSpider) w charakterystyce chemicznej nowego związku. Bazy w poszukiwaniu ścieżek syntezy zaprojektowanej struktury leku (SciFinder, Reaxys)
4. Bazy patentowe w weryfikacji oryginalności projektowanych leków oraz jako żródło metod syntezy nowych związków o znaczeniu farmakologicznym. Podstawy teoretyczne. Warsztaty komputerowe – ćwiczenia w użytkowaniu baz patentowych i pozyskiwaniu z nich informacji przydatnych w poszukiwaniu nowych środków leczniczych.
 |
| Wykaz literatury podstawoweji uzupełniającej | Literatura podstawowa: 1. Baxevanis Andreas D., Ouellette B.F. Francis, *Bioinformatyka. Podręcznik do analizy genów i białek*. Wydawnictwo Naukowe PWN 2005
2. Paul G. Higgs, Teresa K. Attwood, *Bioinformatyka i ewolucja molekularna*, Wydawnictwo Naukowe PWN 2008

Literatura uzupełniająca1. . A.L. Campbell, L.J. Heyer; Discovering Genomics, Proteomics & Bioinformatics, ISBN-13: 978-0805382198
2. http://www.ornl.gov/sci/techresources/Human\_Genome/home.shtml
3. http://www.genomenewsnetwork.org/articles/06\_00/sequence\_primer.shtml
4. Venter, J.C. *et al*. Shotgun sequencing of the human genome. *Science* 280, 1540-1542 (June 5, 1998).
5. Venter, J.C. *et al*. A new strategy for genome sequencing. *Nature* 381, 364-366 (May 30, 1996).
 |