

 Universidade Federal de São João del-Rei	COORDENADORIA DO CURSO DE BIOTECNOLOGIA – COBIT																																	
PLANO DE ENSINO																																		
Curso: Biotecnologia																																		
Grau Acadêmico: Bacharelado	Turno: Integral	Currículo: 2016																																
Unidade Curricular: Bioinformática																																		
Natureza: Obrigatória	Período: 6	Ano/semestre: 2023/1																																
Carga Horária Total: 72 h	Teórica: 52 h	Prática: 20 h																																
Co-requisito: Programação de Computadores e Fundamentos de Engenharia Genética																																		
Docente: Alex Gutterres Taranto		Unidade Acadêmica: DEPEB																																
<p>Ementa: Introdução a Bioinformática. Bancos de dados de informação biológica. Alinhamento de seqüências. Identificação de motivos e domínios regulatórios. Predição gênica. Predição de estrutura de RNA e proteína. Reconstrução filogenética. Análise genômica e genômica comparativa. Análise de expressão gênica. Redes de regulação gênica e redes metabólicas. Proteômica. Programação.</p>																																		
<p>Objetivos: Apresentar ao aluno os tópicos introdutórios da área de bioinformática, assim como introduzir ao uso das ferramentas e metodologias atuais desta área. Os aspectos teóricos serão apresentados através de aulas expositivas e exemplos da literatura, e as ferramentas computacionais serão utilizadas em laboratório de informática. O objetivo é que os estudantes se familiarizem com os métodos, seus princípios, e suas ferramentas.</p>																																		
Conteúdo Programático:																																		
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="width: 15%;">Aula</th> <th>Conteúdo</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Unidade 1</td> <td>Desenvolvimento de Compostos Bioativos por Computador (teórico)</td> </tr> <tr> <td>Aula 1</td> <td>Apresentação do curso, exposição das avaliações e tarefas;</td> </tr> <tr> <td>Aula 2</td> <td>Aspectos gerais da ação dos fármacos; Origem e desenvolvimento de fármacos;</td> </tr> <tr> <td>Aula 3</td> <td>Relação estrutura atividade;</td> </tr> <tr> <td>Aula 4</td> <td>Estratégias de modificação molecular (bioisosterismo, hibridação, simplificação molecular);</td> </tr> <tr> <td>Aula 5</td> <td>Metabolismo e processo de latenciação de fármacos</td> </tr> <tr> <td>Aula 6</td> <td>Ensaio pré-clínicos, clínicos e Propriedade intelectual;</td> </tr> <tr> <td>Aula 7</td> <td>Triagem Virtual com base no Ligante;</td> </tr> <tr> <td>Aula 8</td> <td>Triagem Virtual com Base na Estrutura (ancoragem molecular);</td> </tr> <tr> <td>Aula 9</td> <td>Métodos <i>in silico</i> de determinação de estruturas proteicas.</td> </tr> <tr> <td>Unidade 2</td> <td>Ambiente Linux (experimental)</td> </tr> <tr> <td>Aula 10</td> <td>Introdução ao Linux e uso do shell;</td> </tr> <tr> <td>Aula 11</td> <td>Manipulação de arquivos (editores vi, vim e gedit) e cat</td> </tr> <tr> <td>Aula 12</td> <td>Compactação e descompactação de arquivos;</td> </tr> <tr> <td>Aula 13</td> <td>Estrutura de diretórios;</td> </tr> </tbody> </table>	Aula	Conteúdo	Unidade 1	Desenvolvimento de Compostos Bioativos por Computador (teórico)	Aula 1	Apresentação do curso, exposição das avaliações e tarefas;	Aula 2	Aspectos gerais da ação dos fármacos; Origem e desenvolvimento de fármacos;	Aula 3	Relação estrutura atividade;	Aula 4	Estratégias de modificação molecular (bioisosterismo, hibridação, simplificação molecular);	Aula 5	Metabolismo e processo de latenciação de fármacos	Aula 6	Ensaio pré-clínicos, clínicos e Propriedade intelectual;	Aula 7	Triagem Virtual com base no Ligante;	Aula 8	Triagem Virtual com Base na Estrutura (ancoragem molecular);	Aula 9	Métodos <i>in silico</i> de determinação de estruturas proteicas.	Unidade 2	Ambiente Linux (experimental)	Aula 10	Introdução ao Linux e uso do shell;	Aula 11	Manipulação de arquivos (editores vi, vim e gedit) e cat	Aula 12	Compactação e descompactação de arquivos;	Aula 13	Estrutura de diretórios;		
Aula	Conteúdo																																	
Unidade 1	Desenvolvimento de Compostos Bioativos por Computador (teórico)																																	
Aula 1	Apresentação do curso, exposição das avaliações e tarefas;																																	
Aula 2	Aspectos gerais da ação dos fármacos; Origem e desenvolvimento de fármacos;																																	
Aula 3	Relação estrutura atividade;																																	
Aula 4	Estratégias de modificação molecular (bioisosterismo, hibridação, simplificação molecular);																																	
Aula 5	Metabolismo e processo de latenciação de fármacos																																	
Aula 6	Ensaio pré-clínicos, clínicos e Propriedade intelectual;																																	
Aula 7	Triagem Virtual com base no Ligante;																																	
Aula 8	Triagem Virtual com Base na Estrutura (ancoragem molecular);																																	
Aula 9	Métodos <i>in silico</i> de determinação de estruturas proteicas.																																	
Unidade 2	Ambiente Linux (experimental)																																	
Aula 10	Introdução ao Linux e uso do shell;																																	
Aula 11	Manipulação de arquivos (editores vi, vim e gedit) e cat																																	
Aula 12	Compactação e descompactação de arquivos;																																	
Aula 13	Estrutura de diretórios;																																	

Aula 14	Instalação de pactoes e aplicativos;
Aula 15	Manipulação de arquivos (editores vi, vim e gedit) e cat
Aula 16	Compactação e descompactação de arquivos;
Aula 17	Adiministração de usuários
Aula 18	Processos
Aula 19	Shell Script/Comandos mais usuais do Linux
Aula 20	Compilando arquivos fonte
Aula 21	Criação e Execução ícones em Shell Script e Python
Aula 22	Avaliação I
Aula 23	Resolução da avaliação
Unidade 3	Bioinformática Estrutural
Aula 24	Instalação de programas: pymol, dockg 6, NAMD (paralelo) e datawarrior
Aula 25	Banco de dados de Proteínas (GenBank e PDB), banco de lingantes (Zinc, Pubchem e ChEMBL)
Aula 26	Triagem Virtual com base no Ligante. Programas: Pharmit, PLIP e Pymol;
Aula 27	Triagem Virtual Inversa. Softwares on line: swiss target predict, sc-pdb;
Aula 28	Gerenciamento de ligantes (datawarrior);
Aula 29	Geração de estruturas proteicas (geração, validação e refinamento de modelos de proteínas): ab initio: raptor X, enovelamento i-tasser pyre2, modelagem comparativa SwissModel,
Aula 30	Geração de estruturas proteicas (geração, validação e refinamento de modelos dech proteínas): ab initio: raptor X, enovelamento i-tasser pyre2, modelagem comparativa SwissModel;
Aula 31	Triagem Virtual (docking): DockThor, Autodock Vina;
Aula 32	Dinâmica Molecular: Dock 6 (amber score);
Aula 33	Visita Técnica ao Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC), Petrópolis.
Aula 34	Avaliação II;
Aula 35	Resolução da avaliação II;
Aula 36	Avaliação substitutiva.

Metodologia e Recursos Auxiliares:

O programa será abordado por meio de aulas expositivas, podendo haver ocasionalmente atividades no portal didático, inclusive as avaliações. Os slides serão disponibilizado via portal didático aos alunos. A frequência será registrada e pontuada. **Adicionalmente, as aulas experimentais serão realizadas no Laboratório do Pavilhão de Aulas, sala 104/105, Campus Santo Antônio (CSA).**

*Conforme Resolução 004/2021/CONEP.

Avaliações:

O conteúdo será avaliado pela média de duas provas teóricas (A), com peso 2 cada, e frequência com peso 1 (F). Cada avaliação terá o valor de 10,0 pontos. A nota final será dada pela seguinte fórmula: $(2 \times \text{Avaliação 1} + 2 \times \text{Avaliação 2} + 1 \times \text{frequência})/10$. Haverá apenas uma avaliação substitutiva através do portal didático, com o conteúdo total da disciplina, após a realização de todas as avaliação. Todos os alunos matriculados na

disciplina podem realizar a avaliação substitutiva. As avaliações serão individuais através do portal didático, contendo questões interpretativas, dedutivas e de solução de problemas práticos, podendo haver consulta bibliográfica.

Bibliografia:**Básica:**

PATRICK, Graham. **An Introduction to Medicinal Chemistry**. 6 ed. Oxford University Press 832 p. 2017.

VERLI, Hugo. **Bioinformática: da Biologia a Flexibilidade Molecular**. Porto Alegre: e-book 282 p. 2014.

ROMERO, Daniel. **Começando com o Linux Comandos, serviços e administração**. Casa do Código, São Paulo, 149 p. 2013. ISBN: 978-85-66250-29-9.

Complementar:

DO VAL, Carlos Eduardo. **Ubuntu, Guia do Iniciante 2.0**. Vitória: e-book 191 p. 2012.

THE EUROPEAN BIOINFORMATICS INSTITUTE (EMBL-EBI). Train online. Disponível em: <<https://www.ebi.ac.uk/training/on-demand>>. Acesso em: 24 de nov. de 2022.



Prof. Alex Gutterres Taranto
Docente responsável pela unidade

Profª Ana Paula Madureira
Coordenadora do Curso de Biotecnologia

Aprovado pelo Colegiado de Curso em São João del-Rei, 24 de novembro de 2022.