
Ano Letivo 2019-20

Unidade Curricular DINÂMICA BIOMOLECULAR

Cursos BIOLOGIA MARINHA (1.º ciclo) (*)

(*) Curso onde a unidade curricular é opcional

Unidade Orgânica Faculdade de Ciências e Tecnologia

Código da Unidade Curricular 14121304

Área Científica FÍSICA

Sigla

Línguas de Aprendizagem Português, podendo também ser lecionada em inglês se necessário.

Modalidade de ensino Presencial

Docente Responsável Maria Leonor Nunes Ribeiro Cruzeiro

DOCENTE	TIPO DE AULA	TURMAS	TOTAL HORAS DE CONTACTO (*)
---------	--------------	--------	-----------------------------

* Para turmas lecionadas conjuntamente, apenas é contabilizada a carga horária de uma delas.

ANO	PERÍODO DE FUNCIONAMENTO*	HORAS DE CONTACTO	HORAS TOTAIS DE TRABALHO	ECTS
3º	S1	26T; 24PL; 12S	168	6

* A-Anual;S-Semestral;Q-Quadrimestral;T-Trimestral

Precedências

FÍSICA

Conhecimentos Prévios recomendados

Dinâmica de Newton

Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências)

Pretende-se que os alunos adquiram conhecimentos sobre a análise que é possível fazer de processos biológicos celulares em termos de leis físicas fundamentais, com ênfase para o processo de formação da estrutura das proteínas.

Pretende-se que os alunos adquiram capacidade para usar pacotes (nomeadamente AMBER e NAMD) para a simulação de dinâmica molecular de biomoléculas, assim como os módulos neles existentes para analisar os dados obtidos nessas simulações.

Pretende-se que os alunos fiquem aptos a ler artigos científicos e a seguir discussões científicas sobre os temas tratados.

Num âmbito mais geral, pretende-se também contribuir para o desenvolvimento do espírito crítico e de atitudes pessoais de persistência, de rigor na execução de tarefas, de valores de responsabilidade pessoal, de cooperação e de trabalho em equipa.

Conteúdos programáticos

Revisões sobre as células e os seus organelos, e sobre as três moléculas principais que os constituem: os lípidos, o ADN e, principalmente, as proteínas.

As proteínas como as máquinas da vida. A sua estrutura primária, secundária, terciária e quaternária. Os métodos físicos de determinação da estrutura das proteínas. As bases de dados das estruturas das proteínas. Software freeware para a visualização das proteínas, como o VMD (visual molecular dynamics).

As origens físicas dos diversos termos dos potenciais atómicos usados na dinâmica molecular de proteínas. Exemplos de pacotes para dinâmica molecular clássica, (nomeadamente AMBER e NAMD). A equação de Langevin e outras formas de simular a influência da temperatura na dinâmica das biomoléculas.

As teorias físicas que têm sido propostas para explicar a formação da estrutura das proteínas, as experiências *in vitro* e mais recentemente *in vivo* e as doenças devidas à mal-formação da estrutura das proteínas, Alzheimer's e Creutzfeldt-Jakob.

Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular

Os conteúdos programáticos fornecem informação sobre os as forças físicas principais que influenciam a estrutura das proteínas, assim como das forças que regulam a sua estabilidade.

Nas aulas práticas, os alunos terão primeiro sessões tutoriais sobre os pacotes mais usados para a dinâmica molecular das proteínas e do ADN, assim como sobre os módulos usados na análise e visualização dos dados obtidos nessas simulações. Nestas aulas, os alunos vão também usar esses pacotes em mini-projetos científicos, como estudar a estabilidade de diferentes conformações de uma mesma proteína.

Nas aulas de seminários far-se-ão exposições sobre artigos científicos recentes, estimulando-se também a discussão sobre o conteúdo desses artigos. Além disso, os alunos apresentarão os resultados das suas simulações, discutindo-os no âmbito dos avanços mais recentes nestas áreas.

Metodologias de ensino (avaliação incluída)

Esta UC inclui aulas teóricas, práticas e seminários. As 13 aulas teóricas, de 2h cada, são dedicadas à exposição e discussão dos conteúdos programáticos. As aulas práticas têm 3h cada uma. As duas primeiras são dedicadas a sessões tutoriais e as 6 seguintes são dedicadas a simulações computacionais feitas pelos alunos. Os 6 seminários, de 2h cada um, são dedicados à discussão de artigos recentes e à apresentação dos relatórios dos trabalhos realizados nas aulas práticas.

A avaliação tem uma componente contínua constituída por mini-testes sobre a matéria lecionada nas aulas teóricas, com um peso de 50% na nota final. Os resultados dos trabalhos realizados nas aulas práticas serão resumidos e discutidos num relatório escrito que tem um peso de 35% na nota final, e numa apresentação oral e discussão com um peso de 15% na nota final.

Demonstração da coerência das metodologias de ensino com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular

As aulas teóricas servem, por um lado, para diminuir as barreiras que os alunos possam ter de ultrapassar para adquirir o conhecimento das matérias incluídas nos conteúdos programáticos. Por outro lado, pretende-se que as aulas teóricas sirvam também para estimular a discussão sobre aspetos mais controversos destas matérias, antecipando assim outras discussões que terão lugar durante a discussão de artigos recentes e a apresentação dos trabalhos que irá ocorrer nas aulas de seminários.

Os trabalhos que os alunos realizarão nas aulas práticas torná-los-ão aptos a usar os pacotes que existem para a simulação da dinâmica molecular de proteínas e ADN, e para a análise e visualização dos resultados.

No seu conjunto, os três tipos de aulas permitirão que os alunos adquiram a prática necessária no uso de software, assim como a desenvoltura necessária para contribuir para as discussões e para o trabalho nestas áreas.

Bibliografia principal

Leonor Cruzeiro, Sebenta da disciplina.

M. Daune, Molecular Biophysics: structures in motion, Oxford Univ. Press (1999).

Manual do AMBER .

Academic Year 2019-20

Course unit BIOMOLECULAR DYNAMICS

Courses MARINE BIOLOGY (1st Cycle) (*)

(*) Optional course unit for this course

Faculty / School FACULTY OF SCIENCES AND TECHNOLOGY

Main Scientific Area FÍSICA

Acronym

Language of instruction Portuguese, but it can be lectured in English, if necessary.

Teaching/Learning modality Classroom teaching

Coordinating teacher Maria Leonor Nunes Ribeiro Cruzeiro

Teaching staff	Type	Classes	Hours (*)
----------------	------	---------	-----------

* For classes taught jointly, it is only accounted the workload of one.

Contact hours

T	TP	PL	TC	S	E	OT	O	Total
26	0	24	0	12	0	0	0	168

T - Theoretical; TP - Theoretical and practical ; PL - Practical and laboratorial; TC - Field Work; S - Seminar; E - Training; OT - Tutorial; O - Other

Pre-requisites

FÍSICA

Prior knowledge and skills

Knowledge of Newton dynamics.

The students intended learning outcomes (knowledge, skills and competences)

The students must learn to analyse biological processes using fundamental physical laws, particularly concerning the protein folding process.

The students must also develop the capacity to use packages like AMBER and NAMD for the molecular dynamics simulations of biomolecules, as well as the modules therein for the analysis of the data obtained in the simulations.

The students must also be able to read papers in scientific journals and to follow scientific discussions on the subjects dealt with during this course.

More generally, this course should contribute to the development of personal skills like a more critical mind, persistence and rigour in the execution of tasks, and of values such as personal responsibility, cooperation and team work.

Syllabus

Revisions on the cell and its organelles and on the three main molecules that constitute them: lipids, DNA and, most important in this course, proteins.

Proteins as the machines of life. Their primary, secondary, tertiary and quaternary structure. The physical methods for the determination of protein structure. The structural protein databases. Freeware software for the visualization of proteins, like VMD (Visual Molecular Dynamics). The physical origin of the terms that appear in the atomic potential used in molecular dynamics of proteins. Examples of packages for classical molecular dynamics, like AMBER and NAMD. Langevin equation and other ways of simulating a thermal bath.

The physical theories that have been proposed to explain protein folding, the in vitro experiment of folding and the more recent in vivo experiments. The diseases due to protein misfolding, like Alzheimer's and Creutzfeldt-Jakob disease.

Demonstration of the syllabus coherence with the curricular unit's learning objectives

The syllabus provide information on the main physical forces that influence protein structure and its stability.

In the laboratory classes (LC) the students will first have tutorial sessions on the packages most used for molecular dynamics of proteins and DNA, as as on the modules for the analysis and visualization of the data obtained in the simulations. In LC, the students will also use these packages in scientific mini-projects, like the study of the stability of different conformations of the same protein.

In the first seminar classes (S) recent scientific papers will be presented and discussed. In the following S classes the students will present the results of their simulations which will be discussed with reference to the most recent advances in this area.

Teaching methodologies (including evaluation)

This course includes theory, laboratory and seminar classes. The 13 theory classes, with 2h each, are dedicated to the presentation and discussion of the topics in the syllabus. The laboratory classes have 3h each. The first two will be tutorial sessions and the remaining six will be dedicated to computer simulations carried out the students. The 6 seminar classes, of 2h each, are dedicated to discussion of recent papers and to the reports of the works performed by the students in the laboratory classes.

The evaluation has a continuous component constituted by mini-tests on the topics lectured in the theory classes, with a total weight of 50% in the final mark. The results of the simulation work by the students will be discussed in a written report with a weight of 35%, and also in an oral presentation with a weight of 15% in the final mark.

Demonstration of the coherence between the teaching methodologies and the learning outcomes

The theory classes are used to diminish the barriers the students may have to overcome to acquire the knowledge of the topics included in the syllabus, as well as being a forum for the discussion of those topics. Furthermore, the theory classes will also be used to stimulate the discussion on the most controversial aspects of those topics, in anticipation of other discussions that will occur in the seminar classes, either about recent papers or about the results obtained by the students.

The simulations performed by the students in the laboratory classes will make them able to use the existing packages for molecular dynamics simulations of biomolecules, and for the analysis and visualization of the results of their simualtions.

Taken together, the three types of classes will give the students the intelectual and practical resources to contribute to the discussions and to the progress in the general area of molecular dynamics, with particular emphasis to protein folding.

Main Bibliography

Leonor Cruzeiro, Course notes.

M. Daune, Molecular Biophysics: structures in motion, Oxford Univ. Press (1999).

AMBER Manual.