

---

**Ano Letivo** 2021-22

---

**Unidade Curricular** DINÂMICA BIOMOLECULAR

---

**Cursos** BIOTECNOLOGIA (1.º ciclo) (\*)

BIOQUÍMICA (1.º ciclo) (\*)

BIOLOGIA MARINHA (1.º ciclo) (\*)

BIOLOGIA (1.º ciclo) (\*)  
RAMO: BIOLOGIA

(\*) Curso onde a unidade curricular é opcional

---

**Unidade Orgânica** Faculdade de Ciências e Tecnologia

---

**Código da Unidade Curricular** 14121304

---

**Área Científica** FÍSICA

---

**Sigla**

---

**Código CNAEF (3 dígitos)** 441

---

**Contributo para os Objetivos de  
Desenvolvimento Sustentável - 9  
ODS (Indicar até 3 objetivos)**

---

**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	S2		N/D	6

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

---

**Precedências**

Sem precedências

---

**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, este curso pretende também contribuir para o desenvolvimento do espírito crítico e de atitudes pessoais de persistência e rigor na execução de tarefas, e de valores éticos como a honestidade intelectual, a cooperação e o trabalho em equipa.

---

### **Conteúdos programáticos**

Revisões sobre as células e seus organelos, e sobre as moléculas constituintes principais: os lípidos, os ácidos nucleicos 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 atômicos 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.

---

### **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.

---

### **Bibliografia principal**

Leonor Cruzeiro, Sebenta da disciplina.

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

Manual do AMBER .

---

**Academic Year** 2021-22

---

**Course unit** BIOMOLECULAR DYNAMICS

---

**Courses** BIOTECHNOLOGY (1st Cycle) (\*)  
BIOCHEMISTRY (1st Cycle) (\*)  
MARINE BIOLOGY (1st Cycle) (\*)  
BIOLOGY (1st Cycle) (\*)

(\*) Optional course unit for this course

---

**Faculty / School** FACULTY OF SCIENCES AND TECHNOLOGY

---

**Main Scientific Area** FÍSICA

---

**Acronym**

---

**CNAEF code (3 digits)** 441

---

**Contribution to Sustainable Development Goals - SGD (Designate up to 3 objectives)** 9

---

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

**Teaching/Learning modality**

Classroom based

**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
0	0	0	0	0	0	0	0	N/D

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

**Pre-requisites**

no pre-requisites

**Prior knowledge and skills**

Knowledge of Newton dynamics.

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

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

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

This course also intends to contribute to the development of personal skills like a critical mind, persistence and rigour in the execution of tasks, and of ethical values such as intellectual honesty, 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.

---

### **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 by 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.

---

### **Main Bibliography**

Leonor Cruzeiro, Course notes.

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

AMBER Manual.