
Ano Letivo 2023-24

Unidade Curricular DINÂMICA BIOMOLECULAR

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

BIOQUÍMICA (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

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 (*)
Maria Leonor Nunes Ribeiro Cruzeiro	PL; S; T	T1; PL1; S1	24T; 24PL; 10S

* 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	24T; 24PL; 10S	156	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 AmberTools) para a simulação de dinâmica molecular de biomoléculas, assim como de alguns módulos 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 AmberTools). 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 aulas teóricas, de 2h, são dedicadas à exposição e discussão dos conteúdos programáticos. As aulas práticas, de 2h, têm um conteúdo tutorial sobre questões técnicas do linux e AmberTools e incluem também a submissão de trabalhos computacionais relacionados com um projeto específico. Os seminários 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, com um peso de 50% na nota final. A componente não contínua é feita por um relatório dos resultados dos trabalhos computacionais realizados nas aulas práticas, que tem um peso de 35% na nota final, e pela apresentação oral e discussão do relatórios, com um peso de 15% na nota final. Quem tiver uma nota final igual ou superior a 9,5 está dispensado de exame. Só está admitido a exame quem tiver mais que 9,5 na componente não contínua da avaliação.

Bibliografia principal

Leonor Cruzeiro, Slides da disciplina.

Manual do AMBER .

Artigos de revistas científicas.

Academic Year 2023-24

Course unit BIOMOLECULAR DYNAMICS

Courses BIOLOGY (1st cycle) (*)
BRANCH: BIOLOGY
MARINE BIOLOGY (1st cycle) (*)
BIOCHEMISTRY (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** 9
(Designate up to 3 objectives)

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 (*)
Maria Leonor Nunes Ribeiro Cruzeiro	PL; S; T	T1; PL1; S1	24T; 24PL; 10S

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

Contact hours

T	TP	PL	TC	S	E	OT	O	Total
24	0	24	0	10	0	0	0	156

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

Classical (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 AmberTools 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 AmberTools. Langevin equation and other ways of simulating a thermal bath.

The physical theories that have been proposed to explain protein folding, the in vitro experiments 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 theory classes, of 2h each, are dedicated to the presentation and discussion of the topics in the syllabus. In the laboratory classes, of 2h each, students learn technical aspects related to the submission of computational jobs related to a scientific project. The seminar classes are dedicated to the discussion of recent papers and to oral presentations of the works performed in the laboratory classes.

The evaluation has a continuous component constituted by mini-tests, with a total weight of 50% in the final mark. The non-continuous part is constituted by a written report on the results of the simulations submitted in the practical classes, and their analysis, with a weight of 35%, and by the oral presentation and discussion of the report (15% of the final mark). The students with a final mark of 9,5 are exempt from exam. The students with less than 9,5 in the non-continuous component are not admitted to exam.

Main Bibliography

Leonor Cruzeiro, Course slides.

AMBER Manual.

Papers in scientific journals.