

---

**Ano Letivo** 2021-22

---

**Unidade Curricular** MODELAÇÃO MOLECULAR NO DESIGN DE FÁRMACOS

---

**Cursos** CIÊNCIAS FARMACÊUTICAS (Mestrado Integrado)

---

**Unidade Orgânica** Faculdade de Ciências e Tecnologia

---

**Código da Unidade Curricular** 14881216

---

**Área Científica** QUÍMICA

---

**Sigla**

---

**Código CNAEF (3 dígitos)** 727

---

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

3  
4  
9

**Línguas de Aprendizagem**

Português

**Modalidade de ensino**

Presencial

**Docente Responsável**

Paulo José Garcia de Lemos Trigueiros de Martel

DOCENTE	TIPO DE AULA	TURMAS	TOTAL HORAS DE CONTACTO (*)
Paulo José Garcia de Lemos Trigueiros de Martel	T; TP	T1; TP1	14T; 20TP

\* 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
4º	S1	14T; 20TP	78	3

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

**Precedências**

Sem precedências

**Conhecimentos Prévios recomendados**

Conhecimentos básicos de Química-Física, Química Geral e Orgânica, Bioquímica e Farmacologia. Familiaridade com o uso de ferramentas bioinformáticas on-line.

---

### Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências)

Conhecer os princípios fundamentais do desenho de novos fármacos e do papel das metodologias computacionais neste processo. Compreender as diferenças, aplicabilidade e requisitos das técnicas de desenho de fármacos baseado em ligandos e desenho baseado em estrutura. Conhecer os princípios básicos das interações receptor-ligando e sua energética, no contexto do desenho de novos fármacos. Conhecimento básico do fundamento teórico das técnicas de modelação molecular. Adquirir "skills" na utilização de metodologias de modelação molecular (otimização de geometria, modelação comparativa, 3D-QSAR, docking, dinâmica molecular) no âmbito do processo de desenho de fármacos.

---

### Conteúdos programáticos

1. Introdução
2. Perspectiva sobre o desenho de fármacos
3. Interação receptor-ligando
4. Ferramentas Bioinformáticas no Desenho de Fármacos
5. Fundamentos de Modelação Molecular
6. Modelação comparativa de receptores
7. In silico docking e screening
8. Desenho de Fármacos baseado em Estrutura
9. Desenho de Fármacos baseado em Ligandos.
10. Previsão Computacional de Propriedades ADMET

---

### Metodologias de ensino (avaliação incluída)

Este curso inclui aulas teóricas e teórico-práticas. Nas aulas teóricas são discutidos os fundamentos teóricos das metodologias e são descritas várias ferramentas e métodos, com enquadramento no âmbito geral disciplina. Além da projecção de slides, são dados exemplos de utilização interactiva de algumas ferramentas informáticas. Nas aulas teórico-práticas os alunos usam o computador para aceder a várias ferramentas de *software* (on-line, ou instaladas localmente), com as quais resolvem problemas práticos ligados ao desenho computacional de fármacos, como pesquisa de bases de dados, construção de modelos moleculares, *docking* e modelação por homologia.

Método de avaliação: frequência no final da disciplina, sendo que a reprovação nesta frequência (nota <10) obriga à realização do exame final. A frequência e o exame contêm questões de desenvolvimento e de escolha múltipla, incidindo tanto nos aspectos teóricos como nas actividades desenvolvidas nas aulas teórico-práticas.

### **Bibliografia principal**

1. Blas, D. Basic Principles of Drug Discovery and Development, Academic Press, 2015
2. Krosgaard-Larsen, P.; Strømgaard, K. Textbook of Drug Design and Discovery (5 th ed.), CRC Press, 2016
3. Merz, K.M; Ringe, D.; Reynolds, C.H. (eds.) Drug Design: Structure and Ligand-Based Approaches, Cambridge University Press, 2010
4. Klebe, G. Drug Design: Methodology, Concepts, and Mode of Action, Springer, 2013
5. Hinchliffe, A., Molecular Modelling for Beginners (2 nd ed.), Wiley, 2008
6. Schlick, T. Molecular Modelling and Simulation: an Interdisciplinary guide (2 nd ed), Springer 2010
7. Leach, A.R. Molecular Modelling: Principles and Applications (2 nd ed.), Pearson 2001
8. Cavasotto, C.N. (ed.) In Silico Drug Discovery and Design: Theory, Methods, Challenges and Applications, CRC Press, 2016
9. Gervasio, F.L. (ed.) Biomolecular Simulations in Structure-Based Drug Discovery (Methods and Principles in Medicinal Chemistry, Wiley-VCH, 2019

---

**Academic Year** 2021-22

---

**Course unit** MOLECULAR MODELLING IN THE DESIGN OF DRUGS

---

**Courses** PHARMACEUTICAL SCIENCES (Integrated Master's)

---

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

---

**Main Scientific Area**

---

**Acronym**

---

**CNAEF code (3 digits)** 727

---

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

3
4
9

---

**Language of instruction** Portuguese.

**Teaching/Learning modality**

Presential.

**Coordinating teacher**

Paulo José Garcia de Lemos Trigueiros de Martel

Teaching staff	Type	Classes	Hours (*)
Paulo José Garcia de Lemos Trigueiros de Martel	T; TP	T1; TP1	14T; 20TP

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

**Contact hours**

T	TP	PL	TC	S	E	OT	O	Total
14	20	0	0	0	0	0	0	78

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**

Basic knowledge of Physical Chemistry, General and Organic Chemistry, Biochemistry and Pharmacology.

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

Understanding the basics of drug-receptor interactions. Main aspects of successful drug-design. Compound libraries and their use in drug discovery and design. Fundamental techniques in ligand-based design: 2 and 3D-QSAR, pharmacophore search and mapping. Computational prediction of ADMET properties. The basic concepts and physical principles of molecular modelling. Docking, virtual screening and ligand site analysis of small molecules. Homology modelling of ligand target proteins. Basic training in the use of various software tools for receptor-ligand modelling and structure based drug design.

## Syllabus

1. Introduction to Drug Design and Discovery
  2. Bioinformatics Tools for Drug Design
  3. Introduction to Molecular Modelling
  4. Structure-Based Drug Design
  5. Ligand-Based Drug Design
  6. Fragment-Based Drug Design
  7. Computational prediction of ADMET properties
  8. Case studies
- 

## Teaching methodologies (including evaluation)

This course comprises both theoretical and practical (TP) classes. In the theoretical classes fundamentals of the methodology are discussed, and placed in perspective within the broad field of drug discovery and design. Extensive use of video projection is used for both slides and live interactive demonstrations of software tools and online sites.

In the practical classes, students use computers to access on-line drug design databases and tools, and to run locally installed programs. Each practical class is an opportunity to address a different problem or methodology in computational drug design. These include on-line database searching, docking, virtual screening and homology modelling.

Evaluation method: students are evaluated by means of a test at the end of the course. Failing this test (grade<10) will require taking a final exam. Evaluations include multiple choice and development questions, focusing on both the theoretical content and the practical activities.

---

## Main Bibliography

1. Blas, D. Basic Principles of Drug Discovery and Development, Academic Press, 2015
2. Krosgaard-Larsen, P.; Strømgaard, K. Textbook of Drug Design and Discovery (5 th ed.), CRC Press, 2016
3. Merz, K.M.; Ringe, D.; Reynolds, C.H. (eds.) Drug Design: Structure and Ligand-Based Approaches, Cambridge University Press, 2010
4. Klebe, G. Drug Design: Methodology, Concepts, and Mode of Action, Springer, 2013
5. Hinchliffe, A., Molecular Modelling for Beginners (2 nd ed.), Wiley, 2008
6. Schlick, T. Molecular Modelling and Simulation: an Interdisciplinary guide (2 nd ed), Springer 2010
7. Leach, A.R. Molecular Modelling: Principles and Applications (2 nd ed.), Pearson 2001
8. Cavasotto, C.N. (ed.) In Silico Drug Discovery and Design: Theory, Methods, Challenges and Applications, CRC Press, 2016
9. Gervasio, F.L. (ed.) Biomolecular Simulations in Structure-Based Drug Discovery (Methods and Principles in Medicinal Chemistry, Wiley-VCH, 2019