

<p>POLI ESCOLA SUPERIOR SAÚDE TÉCNICO GUARDA</p>	<h2>GUIA DE FUNCIONAMENTO DA UNIDADE CURRICULAR (GFUC)</h2>	<p><b>MODELO</b> PED.010.03</p>
--	---	-------------------------------------

<b>Curso</b>	<b>Biotecnologia Medicinal</b>						
<b>Unidade curricular (UC)</b>	<b>Design e Modulação Molecular</b>						
<b>Ano letivo</b>	2023/2024	<i>Ano</i>	2	<i>Período</i>	2.º semestre	<i>ECTS</i>	5
<b>Regime</b>	Obrigatório	<i>Tempo de trabalho (horas)</i>		Total: 135	Contacto: 60		
<b>Docente(s)</b>	André Ferreira Moreira Hugo Alexandre Louro Filipe						
<input type="checkbox"/> <i>Responsável da UC ou</i> <input type="checkbox"/> <i>Coordenador(a) Área/Grupo Disciplinar</i> <input checked="" type="checkbox"/> <i>Regente (cf. situação de cada Escola)</i>			André Ferreira Moreira				

### GFUC PREVISTO

#### 1. OBJETIVOS DE APRENDIZAGEM

Desenvolver a perceção das aplicações de design e modulação molecular no processo de desenvolvimento de novas moléculas de interesse terapêutico, desenvolvendo conceitos necessários à adaptação de princípios farmacológicos, biológicos e bioquímicos em indústrias de biotecnologia e farmacêuticas.

No final desta UC o estudante deve ser capaz de:

- adquirir conhecimentos para o desenho computacional de moléculas;
- prever as estruturas e os valores das propriedades de espécies biomoleculares usando equações matemáticas;
- conhecer a formulação de biomoléculas e sistemas biomiméticos;
- conhecer estratégias de modificação e funcionalização de moléculas e sistemas terapêuticos.

#### 2. CONTEÚDOS PROGRAMÁTICOS

##### Programa Teórico-Prático

1. Introdução ao design de moléculas terapêuticas.
2. Estratégias de design de moléculas terapêuticas.
  - Estratégias focadas na estrutura.
  - Estratégias focadas no alvo terapêutico.
3. Refinamento de moléculas terapêuticas.
4. Introdução à Mecânica Quântica e à Mecânica Molecular.
5. Métodos de Monte Carlo, Dinâmica Molecular e *Docking* molecular.
6. Visualização, construção de biomoléculas, e repositórios moleculares.
7. Campos de força atomísticos e campos de força *Coarse-Grained*.

<p>POLI ESCOLA SUPERIOR SAÚDE TÉCNICO GUARDA</p>	<p><b>GUIA DE FUNCIONAMENTO DA UNIDADE CURRICULAR (GFUC)</b></p>	<p><b>MODELO</b> PED.010.03</p>
--	--	-------------------------------------

8. Simulação de dinâmica molecular com o software *GROMACS* – introdução a sistemas Linux e *Clusters* computacionais.
9. Simulação de dinâmica molecular de sistemas proteicos.
10. Simulação de dinâmica molecular de sistemas membranares
11. Técnicas de amostragem aumentada em dinâmica molecular.

#### **Programa Prático**

1. Utilização de programas de computador e bases de dados de bioinformática.
2. Desenho de estruturas químicas em software (*ChemDraw*).
3. *Docking* molecular com os softwares AutoDock e AutoDock Vina.
4. Dinâmica Molecular de sistemas de proteicos com o software GROMACS.
5. Construção de sistemas de simulação com o servidor CHARMM-GUI.
6. Dinâmica Molecular de sistemas de membranas com o software GROMACS.

### **3. DEMONSTRAÇÃO DA COERÊNCIA DOS CONTEÚDOS PROGRAMÁTICOS COM OS OBJETIVOS DA UC**

Os conteúdos programáticos permitirão que os estudantes compreendam os métodos computacionais de modelação biomolecular, de forma a adquirirem bases para o desenho de fármacos.

Ao longo da unidade curricular são colocados ao dispor do aluno um conjunto de metodologias e ferramentas computacionais de modelação/simulação de bioestruturas, que permitem criar e estimular um conhecimento base por forma a que este seja capaz de as aplicar em novas situações.

Nesta unidade curricular é também promovido o interesse pela aprendizagem autónoma, através da pesquisa contínua em bases de dados de moléculas, livros técnicos e revistas da especialidade.

#### **4. BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL**

- Young, D.C. (2009). *Computational drug design: a guide for computational and medicinal chemists*, John Wiley & Sons, Ltd.
- Patrick, G.L. (2017). *An introduction to medicinal chemistry*. (6<sup>th</sup> Edition), Oxford University Press.
- Avendaño, C. (2001). *Introducción a la química farmacéutica*, McGraw Hill-Interamerica de España.
- Roche, V.F., Zito, S.W., Lemke, T., Williams, D.A. (2019). *Foye's Principles of Medicinal Chemistry*. (8<sup>th</sup> Edition), Wolters Kluwer.
- Bases de dados.
- Artigos seleccionados.

 <p>POLI ESCOLA SUPERIOR SAÚDE TÉCNICO GUARDA</p>	<h2 style="text-align: center;">GUIA DE FUNCIONAMENTO DA UNIDADE CURRICULAR (GFUC)</h2>	<p style="text-align: center;"><b>MODELO</b> PED.010.03</p>
--	---	---

### **5. METODOLOGIAS DE ENSINO (REGRAS DE AVALIAÇÃO)**

Nas aulas teórico-práticas recorre-se à exposição dos conteúdos programáticos, proporcionando os conceitos e ilustrações de esquemas relativos a cada tema, mediante suporte audiovisual, estimulando os estudantes para a interação e discussão dos temas abordados. As aulas práticas consistem na visualização e desenho de estruturas químicas, bem como no estudo de casos práticos, utilizando ferramentas computacionais. A avaliação contínua consistirá na realização de duas provas escritas (70%), para além da resolução de questões/exercícios propostos nas aulas práticas (30%). A não aprovação por avaliação contínua (nota <9,5) implica a realização de exame (avaliação 0 a 20 valores), nas épocas previstas para o efeito, de todos os conteúdos programáticos. A nota final será calculada considerando o resultado do exame (70%) e a avaliação da componente prática (30%).

### **6. DEMONSTRAÇÃO DA COERÊNCIA DAS METODOLOGIAS DE ENSINO COM OS OBJETIVOS DA UC**

As metodologias de ensino são coerentes com os objetivos da unidade curricular. A metodologia expositiva das aulas teórico-práticas permite realizar a primeira abordagem aos conteúdos, estimulando os alunos a colocar questões e a fazer raciocínios baseados nos conhecimentos prévios que têm e vão adquirindo ao longo do semestre. Esta abordagem é fundamental para atingir os objetivos relacionados com o conhecimento e a compreensão/aplicação de conceitos. As aulas práticas implementam o desenvolvimento de trabalho contínuo na sala de aula, permitem aplicar os conhecimentos adquiridos nas aulas teóricas e uma constante análise crítica por parte do estudante na resolução de problemas e análise de artigos científicos. O regime de avaliação é concebido para medir o nível das competências desenvolvida e que contempla a avaliação de desempenho, bem como a assiduidade, participação, interesse, capacidade de interpretação e de análise crítica de cada estudante.

### **7. REGIME DE ASSIDUIDADE**

O aproveitamento a esta unidade curricular (avaliação contínua ou exame final) obriga à participação e assiduidade, com presença obrigatória mínima de 85% nas aulas práticas laboratoriais.

### **8. CONTACTOS E HORÁRIO DE ATENDIMENTO**

André Ferreira Moreira | [afmoreira@ipg.pt](mailto:afmoreira@ipg.pt)

Horário de atendimento: Segunda-feira 14h00-18h00

Hugo Alexandre Louro Filipe | [hlfilipe@ipg.pt](mailto:hlfilipe@ipg.pt)

Horário de atendimento: Quarta-feira 10h00-11h00

### **DATA**

**8 de março de 2024**