

ACEF/1920/0313797 — Guião para a auto-avaliação corrigido

I. Evolução do ciclo de estudos desde a avaliação anterior

1. Decisão de acreditação na avaliação anterior.

1.1. Referência do anterior processo de avaliação.

ACEF/1314/13797

1.2. Decisão do Conselho de Administração.

Acreditar

1.3. Data da decisão.

2015-04-15

2. Síntese de medidas de melhoria do ciclo de estudos desde a avaliação anterior, designadamente na sequência de condições fixadas pelo CA e de recomendações da CAE.

2. Síntese de medidas de melhoria do ciclo de estudos desde a avaliação anterior, designadamente na sequência de condições fixadas pelo CA e de recomendações da CAE (Português e em Inglês, PDF, máx. 200kB).

[2. Síntese de medidas de melhoria.pdf](#)

3. Alterações relativas à estrutura curricular e/ou ao plano de estudos(alterações não incluídas no ponto 2).

3.1. A estrutura curricular foi alterada desde a submissão do guião na avaliação anterior?

Sim

3.1.1. Em caso afirmativo, apresentar uma explicação e fundamentação das alterações efetuadas.

Procedeu-se à alteração da paridade das opções passando a Unidade Curricular do bloco livre a fazer parte da oferta curricular no semestre ímpar (1º semestre) e o bloco de opções do mestrado transitou para o semestre par (2º semestre). A oferta disponível no 1º semestre para a Unidade Curricular do bloco livre apresenta uma maior diversidade no conjunto de UC oferecidas, o que será mais vantajoso e vai de encontro aos interesses manifestados pelos estudantes. Foi também alargada a oferta curricular das optativas no 2º semestre que passou a incluir as unidades curriculares de Metais em Biologia e Medicina, Bioquímica Clínica, Fotoquímica, Bases de Dados e Sistema de Tratamento de Águas Residuais e Efluentes Industriais.

3.1.1. If the answer was yes, present an explanation and justification of those modifications.

The parity of the options was changed. The free block's CU (curricular unit) became part of the curricular offer in the odd semester (1st semester) and the master's option block moved to the even semester (2nd semester). The offer available in the 1st semester for the free block course CU was enlarged with new CUs, which will be more advantageous and meets the interests expressed by the students. The new options to be offered in the 2nd semester include Metals in Biology and Medicine, Clinical Biochemistry, Photochemistry, Databases and Wastewater and Industrial Effluent Treatment Systems.

3.2. O plano de estudos foi alterado desde a submissão do guião na avaliação anterior?

Sim

3.2.1. Em caso afirmativo, apresentar uma explicação e fundamentação das alterações efetuadas.

O estabelecimento de um acordo de cooperação internacional sobre a implementação de um programa conjunto de estudos levando à emissão de um duplo diploma de mestrado com a Universidade de Estrasburgo alargou o leque do plano de estudos para incluir (no caso de o estudante optar pelo duplo diploma) duas unidades optativas no plano de estudo, Introdução à Programação (semestre ímpar) e Base de dados (semestre par).

3.2.1. If the answer was yes, present an explanation and justification of those modifications.

The establishment of an international cooperation agreement on the implementation of a joint study program leading to the issuance of a dual master's degree with the University of Strasbourg has broadened the scope of the study plan to include (in case the student chooses the Master double degree) two optional units in the study plan, Introduction to Programming (odd semester) and Databases (even semester).

4. Alterações relativas a instalações, parcerias e estruturas de apoio aos processos de ensino e aprendizagem (alterações não incluídas no ponto 2)

4.1. Registaram-se alterações significativas quanto a instalações e equipamentos desde o anterior processo de avaliação?
Não

4.1.1. Em caso afirmativo, apresentar uma breve explanação e fundamentação das alterações efetuadas.
<sem resposta>

4.1.1. If the answer was yes, present a brief explanation and justification of those modifications.
<no answer>

4.2. Registaram-se alterações significativas quanto a parcerias nacionais e internacionais no âmbito do ciclo de estudos desde o anterior processo de avaliação?
Sim

4.2.1. Em caso afirmativo, apresentar uma síntese das alterações ocorridas.

Estabelecimento de acordo de cooperação internacional sobre a implementação de um programa conjunto de estudos levando à emissão de um duplo diploma de mestrado com a Universidade de Estrasburgo para implementação de um programa educacional moderno, baseado na experiência no ensino de química, quimioinformática e modelagem molecular. O programa de estudo conjunto é baseado nos graus de segundo ciclo locais e dois anos:

- *Mestrado em Ciências e Tecnologia, grau em Química, ramo Quimioinformática na UNISTRA;*
- *Mestrado em Química Bioorgânica na NOVA.*

4.2.1. If the answer was yes, present a synthesis of those changes.

Establishment of an international cooperation agreement on the implementation of a joint study program leading to the issuance of a double master's degree with the University of Strasbourg for the implementation of a modern educational program based on experience in chemistry, chemoinformatics and molecular modeling. The joint study program is based on the local two-year second cycle degrees:

- *Master in Science and Technology, degree in Chemistry, Chemistry area at UNISTRA;*
- *Master in Bioorganic Chemistry at NOVA.*

4.3. Registaram-se alterações significativas quanto a estruturas de apoio aos processos de ensino e aprendizagem desde o anterior processo de avaliação?
Não

4.3.1. Em caso afirmativo, apresentar uma síntese das alterações ocorridas.
<sem resposta>

4.3.1. If the answer was yes, present a synthesis of those changes.
<no answer>

4.4. (Quando aplicável) registaram-se alterações significativas quanto a locais de estágio e/ou formação em serviço, protocolos com as respetivas entidades e garantia de acompanhamento efetivo dos estudantes durante o estágio desde o anterior processo de avaliação?
Não

4.4.1. Em caso afirmativo, apresentar uma síntese das alterações ocorridas.
<sem resposta>

4.4.1. If the answer was yes, present a synthesis of those changes.
<no answer>

1. Caracterização do ciclo de estudos.

1.1 Instituição de ensino superior.
Universidade Nova De Lisboa

1.1.a. Outras Instituições de ensino superior.

1.2. Unidade orgânica (faculdade, escola, instituto, etc.):

Faculdade De Ciências E Tecnologia (UNL)

1.2.a. Outra(s) unidade(s) orgânica(s) (faculdade, escola, instituto, etc.) (proposta em associação):**1.3. Ciclo de estudos.**

Química Bioorgânica

1.3. Study programme.

Bioorganic Chemistry

1.4. Grau.

Mestre

1.5. Publicação do plano de estudos em Diário da República (PDF, máx. 500kB).

[1.5._MBioorg_2018.pdf](#)

1.6. Área científica predominante do ciclo de estudos.

Química

1.6. Main scientific area of the study programme.

Chemistry

1.7.1. Classificação CNAEF – primeira área fundamental, de acordo com a Portaria n.º 256/2005, de 16 de Março (CNAEF-3 dígitos):

422

1.7.2. Classificação CNAEF – segunda área fundamental, de acordo com a Portaria n.º 256/2005, de 16 de Março (CNAEF-3 dígitos), se aplicável:

<sem resposta>

1.7.3. Classificação CNAEF – terceira área fundamental, de acordo com a Portaria n.º 256/2005, de 16 de Março (CNAEF-3 dígitos), se aplicável:

<sem resposta>

1.8. Número de créditos ECTS necessário à obtenção do grau.

120

1.9. Duração do ciclo de estudos (art.º 3 DL n.º 74/2006, de 24 de março, com a redação do DL n.º 63/2016 de 13 de setembro):

2 anos (4 semestres)

1.9. Duration of the study programme (article 3, DL no. 74/2006, March 24th, as written in the DL no. 63/2016, of September 13th):

2 years (4 semesters)

1.10. Número máximo de admissões.

30

1.10.1. Número máximo de admissões pretendido (se diferente do número anterior) e respetiva justificação.

<sem resposta>

1.10.1. Intended maximum enrolment (if different from last year) and respective justification.

<no answer>

1.11. Condições específicas de ingresso.

Podem candidatar-se ao acesso ao ciclo de estudo em Química Bioorgânica (MQBio) os titulares do grau de licenciado ou equivalente legal em licenciaturas das áreas de Ciências Exactas ou Tecnologia. A admissibilidade dos candidatos será avaliada pela Comissão Científica do ciclo de estudos, tendo em conta o plano de estudos realizado pelo estudante no curso de licenciatura.

1.11. Specific entry requirements.

Holders of a degree or legal equivalent degrees in the areas of Exact Sciences and Technology. The eligibility of candidates will be evaluated by the Scientific Committee of the study cycle, taking into account the plan of study undertaken by the student in the undergraduate program.

1.12. Regime de funcionamento.

Outros

1.12.1. Se outro, especifique:

As aulas decorrem entre as 17h - 20h30, podendo haver um turno PL das 14h-17h e um 2º das 17h-20h.

1.12.1. If other, specify:

Classes run from 5pm to 8.30 pm, can exist one PL shift from 2pm-5pm and a 2nd from 5pm-8pm.

1.13. Local onde o ciclo de estudos será ministrado:

O ciclo de estudos decorre na Faculdade de Ciências e Tecnologia. Para os estudantes que optem pelo duplo diploma, o 1º ano é lecionado na FCT e o segundo ano na Universidade de Estrasburgo.

The Master in Bioorganic Chemistry takes place at the Faculty of Science and Technology - Universidade NOVA de Lisboa (FCT-UNL) . For students opting for a dual degree, the first year is taught at FCT-UNL and the second year at the University of Strasbourg.

1.14. Regulamento de creditação de formação académica e de experiência profissional, publicado em Diário da República (PDF, máx. 500kB).

[1.14._Reg.459-2020_creditação de competencias_11-05-2020.pdf](#)

1.15. Observações.

n.a.

1.15. Observations.

n.a.

2. Estrutura Curricular. Aprendizagem e ensino centrados no estudante.

2.1. Percursos alternativos, como ramos, variantes, áreas de especialização de mestrado ou especialidades de doutoramento, em que o ciclo de estudos se estrutura (se aplicável)

2.1. Ramos, opções, perfis, maior/menor, ou outras formas de organização em que o ciclo de estudos se estrutura (se aplicável) / Branches, options, profiles, major/minor, or other forms of organisation compatible with the structure of the study programme (if applicable)

Opções/Ramos/... (se aplicável):

Options/Branches/... (if applicable):

<sem resposta>

2.2. Estrutura curricular (a repetir para cada um dos percursos alternativos)

2.2. Estrutura Curricular -

2.2.1. Ramo, opção, perfil, maior/menor, ou outra (se aplicável).

<sem resposta>

2.2.1. Branches, options, profiles, major/minor, or other (if applicable)

<no answer>

2.2.2. Áreas científicas e créditos necessários à obtenção do grau / Scientific areas and credits that must be obtained before a degree is awarded

Área Científica / Scientific Area	Sigla / Acronym	ECTS Obrigatórios / Mandatory ECTS	ECTS Mínimos Optativos / Minimum Optional ECTS*	Observações / Observations

Química / Chemistry	Q	105	0
Competências Complementares / Transferable Skills	CC	3	0
Qualquer Área Científica / Any Scientific Area	QAC	0	6
Química ou Bioquímica ou Engenharia Química ou Engenharia Sanitária ou Segurança Alimentar/Chem.or Biochem.or Chemical Eng.or Sanitary Eng.or F.Safety	Q/Bq/EQ/ES/SA	0	6
(4 Items)		108	12

2.3. Metodologias de ensino e aprendizagem centradas no estudante.

2.3.1. Formas de garantia de que as metodologias de ensino e aprendizagem são adequadas aos objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências) a desenvolver pelos estudantes, favorecendo o seu papel ativo na criação do processo de aprendizagem.

As metodologias de ensino procuram inserir-se no paradigma de aprendizagem centrada na aquisição de competências, envolvendo o estudante num processo de reflexão e de criatividade conducente à descoberta de soluções. As diferentes UC têm uma organização baseada em aulas teóricas, teórico-práticas e práticas, tendo os respetivos responsáveis autonomia para definirem os métodos que melhor se adequem à transmissão de informação, aplicação prática e desenvolvimento de competências. Sempre que se justifique os estudantes podem ser acompanhados em regime tutorial pelo docente procurando ajustar-se o ritmo a preparação prévia do estudante. É fomentada a apresentação de seminários preparando os alunos para apresentações públicas. A dissertação segue um plano de trabalhos previamente aprovado pela CC do mestrado e é feita a recomendação de apresentação prévia e voluntária dos resultados em apresentação pública a decorrer a meio do período escolar através das Jornadas Intercalares dos Mestrados.

2.3.1. Means of ensuring that the learning and teaching methodologies are coherent with the learning outcomes (knowledge, skills and competences) to be achieved by students, favouring their active role in the creation of the learning process.

Teaching methodologies seek to fit into the learning paradigm focused on skills acquisition, involving the student in a process of reflection and creativity leading to the discovery of solutions. The different CUs are organized in theoretical classes, theory-practice classes and experimental classes. Within this framework autonomy is granted to the responsible teacher to define the methods that are best suited to the transmission of information, practical application and skill development. Whenever appropriate, students may be accompanied on a tutorial basis by the teacher seeking to adjust the pace to the student's prior preparation. Seminars are promoted at various CUs, preparing students for public presentations. The part of the dissertation follows a work plan previously approved by the CC of the master's degree and a recommendation is made for the voluntary presentation of the results in a public presentation in the middle of the school period through the Master Degree Days.

2.3.2. Forma de verificação de que a carga média de trabalho necessária aos estudantes corresponde ao estimado em ECTS.

Em cada unidade curricular a carga média de trabalho requerida aos estudantes é estimada pelo docente responsável, com base na sua experiência. A distribuição pelas diferentes atividades é alvo de análise, por forma a assegurar que corresponde ao esforço atribuído à UC. A interação aberta e com elevado grau de proximidade entre os estudantes e o corpo docente permite aferir, durante o decurso da disciplina, o esforço efetivamente realizado pelos estudantes. Quando necessário o corpo docente toma as medidas corretivas adequadas que estão patentes em algumas UC (ver fichas das UC) que sofreram alterações pontuais. A FCT efetua, em todos os semestres, inquéritos junto do corpo docente e dos estudantes para verificar a adequabilidade da carga horária de trabalho dos ECTS previstos para cada unidade curricular.

2.3.2. Means of verifying that the required average student workload corresponds to the estimated in ECTS.

The average workload required by a module is estimated by its head teacher, based on its experience. The distribution among the activities is analysed, to ensure that the effort assigned is adequate. The interaction between students and teachers allows the on-line assessment of the effort actually performed by the students. When needed, suitable corrective actions are taken. The FCT carries out surveys in all semesters, involving both teachers and students, to check the suitability of the ECTS workload estimated for each curricular unit.

2.3.3. Formas de garantia de que a avaliação da aprendizagem dos estudantes é feita em função dos objetivos de aprendizagem.

-Os objetivos de cada UC assim como outra informação relevante é disponibilizada on-line, na plataforma de informação, CLIP. Elementos de estudo são igualmente disponibilizados no CLIP. As várias formas de avaliação de cada UC, são concebidas e estruturadas pelos docentes dessa UC, de forma a garantir uma avaliação adequada da aprendizagem em função dos objetivos propostos.

-A garantia da adequação da avaliação aos objetivos é verificada ao nível da Coordenação do Curso, através de reunião de responsáveis das UC com a Coordenação de Curso, de modo analisar/corrigir os métodos de avaliação, tendo em conta os resultados dos inquéritos aos alunos e a implementação do regulamento geral de avaliação da FCT.
-A Coordenação do Curso tem atenção à calendarização da avaliação de modo a que esta seja o melhor distribuída ao longo do semestre. Relativamente à dissertação, há um acompanhamento da CC a meio do período através das Jornadas Intercalares dos Mestrados promovidas pelo DQ e DCV.

2.3.3. Means of ensuring that the student assessment methodologies are aligned with the intended learning outcomes.

- *The objectives of each module are available online, in a special platform - CLIP.*
- *The various forms of evaluation at each module (tests, exams, laboratories, etc.) are designed and structured by all teachers affected to the module, ensuring an adequate assessment of the learning goals.*
- *Ensuring the adequacy of the assessment objectives is also checked at the coordination of the course, including the meetings of professors responsible for each CU with the Master's Coordination Board, in order to analyse / correct methods of evaluation in each semester, taking into account the results of the surveys to students and the implementation of the general evaluation regulation of FCT NOVA.*
- *The Course Coordination Board also pays attention to the evaluation schedule so that it is best distributed throughout the semester. Concerning the preparation part for the dissertation, there is a mid-term follow-up of the CC through the Intermediate Masters Days promoted by DQ and DCV.*

2.4. Observações**2.4 Observações.**

Como forma de preparação para a atividade científica, diversas unidades curriculares abordam temas tecnologicamente avançados e com grande grau de atualidade. É promovida a realização de atividades de pesquisa e análise bibliográfica e a preparação de resumos do estado da arte e análise crítica de artigos. O trabalho de dissertação corresponde a uma atividade de I&D onde a existência de uma componente original é um requisito. Frequentemente, os temas de dissertação oferecidos estão diretamente associados à atividade de investigação dos respetivos orientadores. Como forma de validação do trabalho de investigação desenvolvido, e também para promover a sua divulgação, a publicação de artigos científicos é um fator relevante na avaliação da dissertação.

2.4 Observations.

As a way to prepare for scientific activity, several curricular units address technologically advanced subjects. The elaboration of survey reports and the preparation of state of the art summaries, as well as the review of scientific articles are promoted activities. The dissertation corresponds to a R&D activity where the existence of an original component is a requirement. Often, the dissertation themes offered to the students are directly linked to research activity of their supervisors. As a way of validating the research work developed, and also to promote its dissemination, publication of scientific papers is a relevant factor in assessing the dissertation.

3. Pessoal Docente**3.1. Docente(s) responsável(eis) pela coordenação do ciclo de estudos.****3.1. Docente(s) responsável(eis) pela coordenação do ciclo de estudos.**

Paula Cristina de Sérgio Branco

3.3 Equipa docente do ciclo de estudos (preenchimento automático)**3.3. Equipa docente do ciclo de estudos / Study programme's teaching staff**

Nome / Name	Categoria / Category	Grau / Degree / Specialist	Especialista / Specialist	Área científica / Scientific Area	Regime de tempo / Employment link	Informação / Information
Ana Maria Ferreira da Costa Lourenço	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor		Química	100	Ficha submetida
Ana Rita Cruz Duarte	Professor Associado ou equivalente	Doutor		Engenharia Química	100	Ficha submetida
António Carlos Bárbara Grilo	Professor Associado ou equivalente	Doutor		Gestão Industrial - Comércio Electrónico	100	Ficha submetida
António Gil de Oliveira Santos	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor		Química Orgânica	100	Ficha submetida
António Jorge Dias Parola	Professor Associado ou equivalente	Doutor		Química	100	Ficha submetida
António Pedro Macedo Coimbra Mano	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor		Engenharia Sanitária	100	Ficha submetida
Carlos Alberto Gomes Salgueiro	Professor Associado ou equivalente	Doutor		Bioquímica	100	Ficha submetida
César Antonio Tonicha Laia	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor		Engenharia Química	100	Ficha submetida
Elvira Maria Sardão Monteiro Gaspar	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor		Química	100	Ficha submetida
Eurico José da Silva Cabrita	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor		Química	100	Ficha submetida

Hugo Miguel Baptista Carreira dos Santos	Professor Auxiliar convidado ou equivalente	Doutor	Biochemistry, Proteomics	20	Ficha submetida
João Montargil Aires de Sousa	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor	Química / Química Orgânica	100	Ficha submetida
João Paulo da Costa Noronha	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor	Química/Química Orgânica	100	Ficha submetida
José Manuel Leitão Sardinha	Professor Auxiliar convidado ou equivalente	Mestre	Engenharia Sanitária	40	Ficha submetida
José Ricardo Ramos Franco Tavares	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor	Química	100	Ficha submetida
Luísa Maria da Silva Pinto Ferreira	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor	Química / Química Orgânica	100	Ficha submetida
Luz Catarina Neves Fernandes	Professor Auxiliar convidado ou equivalente	Doutor	Química Sustentável	20	Ficha submetida
Maria João Lobo de Reis Madeira Crispim Romão	Professor Catedrático ou equivalente	Doutor	Química	100	Ficha submetida
Maria Manuel Martinho Sequeira Barata Marques	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor	Química Orgânica	100	Ficha submetida
Maria Manuela Marques Araújo Pereira	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor	Química- Química Orgânica	100	Ficha submetida
Maria Margarida Canas Mendes de Almeida Cardoso	Professor Auxiliar convidado ou equivalente	Doutor	Engenharia Química - Fenómenos de Transferência	100	Ficha submetida
Maria Paula Amaro de Castilho Duarte	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor	Ciências do Ambiente	100	Ficha submetida
Nuno Miguel Jesuíno Basílio	Professor Auxiliar convidado ou equivalente	Doutor	Química	20	Ficha submetida
Paula Cristina de Sério Branco	Professor Auxiliar ou equivalente	Doutor	Química/Química Orgânica	100	Ficha submetida
Susana Filipe Barreiros	Professor Associado ou equivalente	Doutor	Química Física	100	Ficha submetida
				2200	

<sem resposta>

3.4. Dados quantitativos relativos à equipa docente do ciclo de estudos.

3.4.1. Total de docentes do ciclo de estudos (nº e ETI)

3.4.1.1. Número total de docentes.

25

3.4.1.2. Número total de ETI.

22

3.4.2. Corpo docente próprio do ciclo de estudos

3.4.2. Corpo docente próprio – docentes do ciclo de estudos em tempo integral / Number of teaching staff with a full time employment in the institution.*

Corpo docente próprio / Full time teaching staff	Nº de docentes / Staff number	% em relação ao total de ETI / % relative to the total FTE
Nº de docentes do ciclo de estudos em tempo integral na instituição / No. of teaching staff with a full time link to the institution:	21	95.454545454545

3.4.3. Corpo docente do ciclo de estudos academicamente qualificado

3.4.3. Corpo docente academicamente qualificado – docentes do ciclo de estudos com o grau de doutor / Academically qualified teaching staff – staff holding a PhD

Corpo docente academicamente qualificado / Academically qualified teaching staff	Nº de docentes (ETI) / Staff number in FTE	% em relação ao total de ETI* / % relative to the total FTE*
--	--	--

Docentes do ciclo de estudos com o grau de doutor (ETI) /
Teaching staff holding a PhD (FTE):

21.6

98.181818181818

3.4.4. Corpo docente do ciclo de estudos especializado

3.4.4. Corpo docente do ciclo de estudos especializado / Specialised teaching staff of the study programme

Corpo docente especializado / Specialized teaching staff	Nº de docentes (ETI) / Staff number in FTE	% em relação ao total de ETI* / % relative to the total FTE*	
Docentes do ciclo de estudos com o grau de doutor especializados nas áreas fundamentais do ciclo de estudos (ETI) / Teaching staff holding a PhD and specialised in the fundamental areas of the study programme	19.6	89.090909090909	22
Especialistas, não doutorados, de reconhecida experiência e competência profissional nas áreas fundamentais do ciclo de estudos (ETI) / Specialists not holding a PhD, with well recognised experience and professional capacity in the fundamental areas of the study programme	0	0	22

3.4.5. Estabilidade do corpo docente e dinâmica de formação

3.4.5. Estabilidade e dinâmica de formação do corpo docente / Stability and development dynamics of the teaching staff

Estabilidade e dinâmica de formação / Stability and training dynamics	Nº de docentes (ETI) / Staff number in FTE	% em relação ao total de ETI* / % relative to the total FTE*	
Docentes do ciclo de estudos em tempo integral com uma ligação à instituição por um período superior a três anos / Teaching staff of the study programme with a full time link to the institution for over 3 years	21	95.454545454545	22
Docentes do ciclo de estudos inscritos em programas de doutoramento há mais de um ano (ETI) / FTE number of teaching staff registered in PhD programmes for over one year	0	0	22

4. Pessoal Não Docente

4.1. Número e regime de dedicação do pessoal não docente afeto à lecionação do ciclo de estudos.

O Departamento de Química (DQ) integra, atualmente, funcionários da Administração Pública, técnicos e bolseiros contratados pelos centros de investigação UCIBIO e LAQV-REQUIMTE. Estes funcionários desempenham funções associadas ao funcionamento geral dos sectores e dos vários ciclos de estudo do DQ.

Existem 7 técnicos de laboratórios que prestam apoio às aulas práticas nos laboratórios de ensino do DQ (3 da Administração Pública e 4 da Fundação - Universidade NOVA de Lisboa). O DQ tem 8 funcionários administrativos (4 da Administração Pública, 1 da Fundação - NOVA e 2 funcionários e um bolseiro contratado pelos centros de investigação).

Os laboratórios de Análises dos centros de investigação integram 8 técnicos superiores (2 dos quais bolseiros), todos contratados pelos centros de investigação.

O DQ conta ainda com o apoio dos serviços gerais da FCT, designadamente da Divisão Apoio Técnico, Divisão de Planeamento e Gestão da Qualidade, Divisão Académica e da Divisão de Informática.

4.1. Number and employment regime of the non-academic staff allocated to the study programme in the present year.

The Chemistry Department (DQ) currently includes Public Administration staff, technicians and scholarship holders hired by the UCIBIO- and LAQV-REQUIMTE research centers. These staff perform functions associated with the overall functioning of the sectors and the various DQ study cycles. There are 7 laboratory technicians who provide direct support to practical classes in the department's teaching laboratories (3 Public Administration staff and 4 Foundation staff-Universidade Nova de Lisboa). The department also has 8 administrative staff (4 Public Administration staff, 1 Foundation employee-Uni. NOVA de Lisboa and 2 staff and 1 fellow hired by the research centers). The Research Centers' Analysis laboratories include 8 senior technicians (2 of whom are scholarship holders), all hired by the research centers. The DQ also has the support of the general services of FCT NOVA, namely the Technical Division, Planning and Quality Management Division, Academic Division and the Informatics Division..

4.2. Qualificação do pessoal não docente de apoio à lecionação do ciclo de estudos.

Os 7 técnicos dos laboratórios de ensino possuem como habilitações o ensino secundário ou inferior. Nos funcionários administrativos, 4 possuem o ensino secundário, 3 são licenciados e um doutorado.

Os técnicos dos laboratórios de análise são na maioria licenciados (4), 2 possuem o grau de Mestre e 2 possuem o Doutoramento.

4.2. Qualification of the non-academic staff supporting the study programme.

The 7 technicians of the teaching laboratories have secondary school or lower education qualifications. Of the administrative staff, 4 have secondary school education, 3 are graduates and a doctorate.

The technicians of the analysis laboratories are mostly graduated at the Licenciatura degree (4), 2 have a Master's degree and 2 have a PhD.

5. Estudantes

5.1. Estudantes inscritos no ciclo de estudos no ano letivo em curso

5.1.1. Estudantes inscritos no ciclo de estudos no ano letivo em curso

5.1.1. Total de estudantes inscritos.

44

5.1.2. Caracterização por género

5.1.1. Caracterização por género / Characterisation by gender

Género / Gender	%
Masculino / Male	57
Feminino / Female	43

5.1.3. Estudantes inscritos por ano curricular.

5.1.3. Estudantes inscritos por ano curricular / Students enrolled in each curricular year

Ano Curricular / Curricular Year	Nº de estudantes / Number of students
1º ano curricular	24
2º ano curricular	20
	44

5.2. Procura do ciclo de estudos.

5.2. Procura do ciclo de estudos / Study programme's demand

	Penúltimo ano / One before the last year	Último ano/ Last year	Ano corrente / Current year
N.º de vagas / No. of vacancies	30	30	30
N.º de candidatos / No. of candidates	32	37	24
N.º de colocados / No. of accepted candidates	23	36	24
N.º de inscritos 1º ano 1ª vez / No. of first time enrolled	17	26	23
Nota de candidatura do último colocado / Entrance mark of the last accepted candidate	0	0	0
Nota média de entrada / Average entrance mark	0	0	0

5.3. Eventual informação adicional sobre a caracterização dos estudantes

5.3. Eventual informação adicional sobre a caracterização dos estudantes.

n.a.

5.3. Eventual additional information characterising the students.

n.a.

6. Resultados

6.1. Resultados Académicos

6.1.1. Eficiência formativa.

6.1.1. Eficiência formativa / Graduation efficiency

	Antepenúltimo ano / Two before the last year	Penúltimo ano / One before the last year	Último ano / Last year
N.º graduados / No. of graduates	22	22	11
N.º graduados em N anos / No. of graduates in N years*	18	17	6
N.º graduados em N+1 anos / No. of graduates in N+1 years	4	5	4
N.º graduados em N+2 anos / No. of graduates in N+2 years	0	0	1
N.º graduados em mais de N+2 anos / No. of graduates in more than N+2 years	0	0	0

Pergunta 6.1.2. a 6.1.3.

6.1.2. Apresentar relação de teses defendidas nos três últimos anos, indicando, para cada uma, o título, o ano de conclusão e o resultado final (exclusivamente para cursos de doutoramento).

n.a.

6.1.2. List of defended theses over the last three years, indicating the title, year of completion and the final result (only for PhD programmes).

n.a.

6.1.3. Comparação do sucesso escolar nas diferentes áreas científicas do ciclo de estudos e respetivas unidades curriculares.

O sucesso escolar é elevado o que é natural num 2º ciclo. O número mais elevado de reprovações encontrado é referente à UC de Dissertação em Química Bioorgânica. Para este valor contribuem não só os estudantes que necessitaram de mais um semestre para completar a escrita da dissertação assim como os estudantes que ingressam em 3ª fase (correspondente à entrada no 2º semestre). Estes estudantes têm que entregar a dissertação em fevereiro do ano letivo seguinte, o que corresponde a uma reprovação no 2º ano letivo do curso.

6.1.3. Comparison of the academic success in the different scientific areas of the study programme and the respective curricular units.

School success is high as expected for a 2nd cycle. The highest number of failures found refers to the CU Dissertation in Bioorganic Chemistry. To this amount contributes not only the students who needed one more semester to complete the writing of the dissertation as well as students who enter the 3rd phase (corresponding to the entry in the 2nd semester). These students must submit the dissertation in February of the following school year, which corresponds to a failure in the 2nd school year of the course.

6.1.4. Empregabilidade.

6.1.4.1. Dados sobre desemprego dos diplomados do ciclo de estudos (estatísticas da DGEEC ou estatísticas e estudos próprios, com indicação do ano e fonte de informação).

Ano de 2016

T.E: Taxa de Emprego = Nº de diplomados empregados / Nº de diplomados total – 75%

T.D: Taxa de Desemprego = Nº de diplomados desempregados / Nº de diplomados ativos - 0%

P.D: percentagem de desempregados = Nº de diplomados desempregados / Nº de diplomados total - 0%

Rendimento: rendimento médio líquido mensal do diplomado – 975 euros

A.V: ajustamento (vertical) do emprego ao nível de instrução – 87,5%

Tx resposta: taxa de resposta ao inquérito OBIPNOVA -50%

Ano de 2017

T.E: Taxa de Emprego = Nº de diplomados empregados / Nº de diplomados total – 61,1%

T.D: Taxa de Desemprego = Nº de diplomados desempregados / Nº de diplomados ativos - 0%

P.D: percentagem de desempregados = Nº de diplomados desempregados / Nº de diplomados total - 0%

Rendimento: rendimento médio líquido mensal do diplomado – 952 euros

A.V: ajustamento (vertical) do emprego ao nível de instrução – não apresentado

Tx resposta: taxa de resposta ao inquérito OBIPNOVA -81,8%

6.1.4.1. Data on the unemployment of study programme graduates (statistics from the Ministry or own statistics and studies, indicating the year and the data source).

Year 2016

ET: Employment tax = No. of graduates employed / No. of total graduates – 75%

UT: Unemployment tax = No. of unemployed graduates / No. of active graduates – 0%

PU: percentage of unemployed = No. of unemployed graduates / No. of total graduates – 0%

AV: adjustment of employment (vertical) to education level - not shown – 87.5%

RT: OBIPNOVA survey response tax – 50%

Year 2017

ET: Employment tax = No. of graduates employed / No. of total graduates – 61.6%

UT: Unemployment tax = No. of unemployed graduates / No. of active graduates – 0%

PU: percentage of unemployed = No. of unemployed graduates / No. of total graduates – 0%

AV: adjustment of employment (vertical) to education level - not shown

RT: OBIPNOVA survey response tax – 81.8%

6.1.4.2. Reflexão sobre os dados de empregabilidade.

Tendo em atenção os dados apresentados, no ano de 2016, dos 50% das respostas, 75% estão empregados e com um valor elevado de ajustamento à formação (87,5%). Tendo em atenção que a TD é 0%, os restantes 25% deverão ser graduados que prosseguiram para estudos de pós-graduação. Já em 2017, a taxa de resposta subiu para 81,8% sendo a taxa de empregabilidade de 61,1% mantendo-se também uma TD de 0%.

6.1.4.2. Reflection on the employability data.

Taking into account the data presented in 2016 of the 50% of the responses, 75% are employed and have a high training adjustment value (87.5%). Bearing in mind that UR is 0%, the remaining 25% should be graduates who proceeded to postgraduate studies. In 2017, the response rate increased to 81.8% and the employability rate of 61.1%, also maintaining a UR of 0%.

6.2. Resultados das atividades científicas, tecnológicas e artísticas.

6.2.1. Centro(s) de investigação, na área do ciclo de estudos, em que os docentes desenvolvem a sua atividade científica

6.2.1. Centro(s) de investigação, na área do ciclo de estudos, em que os docentes desenvolvem a sua actividade científica / Research Centre(s) in the area of the study programme, where the teachers develop their scientific activities

Centro de Investigação / Research Centre	Classificação (FCT) / Mark (FCT)	IES / Institution	N.º de docentes do ciclo de estudos integrados/ No. of integrated study programme's teachers	Observações / Observations
LAQV-REQUIMTE	Excelente / Excellent	FCT NOVA	15	https://www.fct.unl.pt/investigacao/laboratorio-associado-para-quimica-verde-tecnologias-limpas-e-processos
UCBIO-REQUIMTE	Excelente / Excellent	FCT NOVA	4	https://www.fct.unl.pt/investigacao/unidade-de-ciencias-biomoleculares-aplicadas

Pergunta 6.2.2. a 6.2.5.

6.2.2. Mapa-resumo de publicações científicas do corpo docente do ciclo de estudos em revistas internacionais com revisão por pares, livros ou capítulos de livros, ou trabalhos de produção artística, relevantes para o ciclo de estudos.

<http://www.a3es.pt/si/iportal.php/cv/scientific-publication/formId/6232f951-56cd-cf93-8016-5dadd3a14da5>

6.2.3. Mapa-resumo de outras publicações relevantes, designadamente de natureza pedagógica:

<http://www.a3es.pt/si/iportal.php/cv/other-scientific-publication/formId/6232f951-56cd-cf93-8016-5dadd3a14da5>

6.2.4. Atividades de desenvolvimento tecnológico e artístico, prestação de serviços à comunidade e formação avançada na(s) área(s) científica(s) fundamental(ais) do ciclo de estudos, e seu contributo real para o desenvolvimento nacional, regional e local, a cultura científica e a ação cultural, desportiva e artística.

Das atividades realizadas pelo Departamento de Química salientam-se:

- Vários Workshops temáticos de formação avançada na área da Instrumentação, Proteómica e da Química Estrutural
- Ciclos vários de conferências do DQ envolvendo oradores da FCT NOVA e exteriores
- Presença na “Noite dos Investigadores” desde o primeiro momento até hoje, sendo um programa financiado pela Comissão Europeia e ainda a Organização e participação nas Olimpíadas de Ciência da União Europeia (EUSO). Sob a égide da EUSO e SPQ, em 2019 teve lugar no DQ-FCT-NOVA
- São ainda mantidos em regime regular, protocolos com Escolas Secundárias na área geográfica da FCT NOVA bem como região de Lisboa, em que os estudantes de 10º, 11º e 12º anos de escolaridade (em média nos últimos 5 anos de 1800 estudantes), se deslocam à FCT NOVA, designadamente ao DQ, para executar os trabalhos práticos dos seus programas de escolaridade, da disciplina de Físico-Química (10º e 11º anos) e de Química (12º ano). Muitas destas escolas não têm capacidade física e material para os executarem. Os estudantes do 12º ano deslocam-se até 10 vezes para executar 10 trabalhos práticos. Estas atividades decorrem todas as 4ªfeiras à tarde, durante todo o ano letivo, como comprova uma recente publicação em capítulo de livro de 2017 - <https://library.iated.org/view/GOMESDASILVA2017CHE>.
- Programa Ciência Viva – Ocupação de Jovens nas férias, foi desde sempre uma constante, tal como é a forte

presença durante a EXPO-FCT em todas as suas edições (desde 2007, todos os anos uma mostra da FCT NOVA e sua oferta educativa de Ensino superior e da sua investigação científica) e na Mostra de Ensino Superior Futurália e nas corridas solidárias da FACIT - Associação de Solidariedade da FCT NOVA tendo como objetivos a conceção, apoio, promoção e execução de programas e ações de solidariedade social em benefício de estudantes ou funcionários carenciados da FCT NOVA.

- No ano de 2019, o corpo docentes e de investigadores do DQ teve participação ativa e vigorosa na comemoração dos 150 anos da Tabela Periódica, organizando eventos, seminários e palestras para a comunidade FCT NOVA bem como para a comunidade envolvente, tendo sido sempre eventos abertos ao público em geral. Refira-se ainda que, vários elementos do DQ pertencem a comissões científicas e de organização local de uma variedade de eventos da especialidade, bem como pertencem a corpos editoriais de várias revistas científicas nacionais e internacionais.

6.2.4. Technological and artistic development activities, services to the community and advanced training in the fundamental scientific area(s) of the study programme, and their real contribution to the national, regional or local development, the scientific culture and the cultural, sports or artistic activity.

Department of Chemistry activity highlights include:

- Organization, on a regular basis, of several Advanced Training Workshops on areas such as Instrumentation, Proteomics and Structural Chemistry.
- Organization, on a regular basis, of cycles of conferences on chemistry-related issues involving both FCT NOVA and external speakers.
- Presence in the European Researchers Night from the first moment until today, being a program funded by the European Commission and also the Organization and participation in the European Union Science Olympiad (EUSO). Under the auspices of EUSO and SPQ, 2019 took place at DQ-FCT NOVA.
- Protocols with Secondary Schools in the geographical area of FCT NOVA as well as the Lisbon region are also maintained on a regular basis, where 10th, 11th and 12th grade students (on average in the last 5 years of 1800 pupils), They go to FCT NOVA, namely DQ, to carry out the practical work of their schooling programs, the subject of Physics-Chemistry (10th and 11th grades) and Chemistry (12th grade). Many of these schools lack the physical and material capacity to run them. 12th graders travel up to 10 times to perform 10 hands-on assignments. These activities take place every Wednesday afternoon throughout the school year, as evidenced by a recent 2017 book chapter publication - <https://library.iated.org/view/GOMESDASILVA2017CHE>.
- Live Science Program - Youth Occupation on vacation, has always been a constant, as is the strong presence during EXPO-FCT in all its editions (since 2007, every year a show of FCT UNL and its educational offer Higher Education and its scientific research) and the Futurália Higher Education Show and the solidarity races of FACIT - Solidarity Association of FCT UNL having as objectives the conception, support, promotion and execution of programs and actions of social solidarity for the benefit. needy students or staff at FCT UNL.
- In 2019, DQ faculty and researchers participated actively and vigorously in the commemoration of the 150th anniversary of the Periodic Table, organizing events, seminars and lectures for the FCT NOVA community as well as the surrounding community. events open to the general public. It should also be noted that various elements of DQ belong to scientific and local organization committees of a variety of specialty events, as well as to editorial boards of various national and international scientific journals.

6.2.5. Integração das atividades científicas, tecnológicas e artísticas em projetos e/ou parcerias nacionais e internacionais, incluindo, quando aplicável, indicação dos principais projetos financiados e do volume de financiamento envolvido.

AÇÕES DE DIVULGAÇÃO AO PÚBLICO

Os investigadores estão envolvidos em várias ações de divulgação: dias abertos, visitas de escolas, workshops, seminários públicos e eventos para entidades locais (escolas, hospitais, feiras de ciência, etc). O LAQV-Requimte também participa em atividades de divulgação de ciência a nível nacional através de colaborações com a Ciência Viva, assim como na Noite Europeia dos Investigadores.

Coordenação e Participação em vários Projetos Colaborativos Internacionais, incluindo 1 ERC, 1 MSCA EID-ITN, 3 projetos financiados pelo H2020, e 2 COST.

6.2.5. Integration of scientific, technologic and artistic activities in projects and/or partnerships, national or international, including, when applicable, the main projects with external funding and the corresponding funding values.

Public Dissemination Actions: Researchers are involved in various outreach actions: open days, school visits, workshops, public seminars and events for local entities. (schools, hospitals, science fairs, etc.). LAQV-Requimte also participates in science outreach activities nationwide through collaborations with Live Science, as well as the European Researchers Night.

Coordination of International Collaborative Projects: PI in 15 International Collaborative Projects (1 MSCA, 3 ERA-NETs); InnoINDIGO (EU-India); Cooperation

Bilateral with the São Paulo State Research Support Foundation (FAPESP); National Research Agency (ANR - France). Coordination and Participation in various International Collaborative Projects, including 1 ERC, 1 MSCA EID-ITN, 3 H2020 funded projects, and 2 COST.

6.3. Nível de internacionalização.

6.3.1. Mobilidade de estudantes e docentes

6.3.1. Mobilidade de estudantes e docentes / Mobility of students and teaching staff

	%
Alunos estrangeiros matriculados no ciclo de estudos / Foreign students enrolled in the study programme	5

Alunos em programas internacionais de mobilidade (in) / Students in international mobility programmes (in)	1
Alunos em programas internacionais de mobilidade (out) / Students in international mobility programmes (out)	1
Docentes estrangeiros, incluindo docentes em mobilidade (in) / Foreign teaching staff, including those in mobility (in)	19
Mobilidade de docentes na área científica do ciclo de estudos (out) / Teaching staff mobility in the scientific area of the study (out).	13

6.3.2. Participação em redes internacionais com relevância para o ciclo de estudos (redes de excelência, redes Erasmus).

6.3.2. Participação em redes internacionais com relevância para o ciclo de estudos (redes de excelência, redes Erasmus).

Acordos de mobilidade (redes Erasmus) ao nível da universidade NOVA (www.unl.pt/internacional/internacional) e ao nível do departamento (www.fct.unl.pt/pessoal/mobilidade/acordos-interinstitucionais-erasmus). Salientam-se, por exemplo, os acordos com Universität Leipzig (DE), Università degli Studi di Pavia (IT), Université de Nantes (UFR Sciences et Techniques) (FR), Lodz University of Technology (PL), Universitatea Babeş-Bolyai (Facultatea de Fizica) (RO), Kaunas University of Technology (F. Chemical Technology) (LT), Universidade de Viena, Áustria e na Charles University, Faculty of Sciences, Republica Checa etc.

6.3.2. Participation in international networks relevant for the study programme (excellence networks, Erasmus networks, etc.).

Mobility agreements (Erasmus networks) at the University NOVA level (www.unl.pt/internacional/internacional) and at Department level (www.fct.unl.pt/pessoal/mobilidade/acordos-interinstitucionais-erasmus). Examples of such networks are in place for Universität Leipzig (DE), Università degli Studi di Pavia (IT), Université de Nantes (UFR Sciences et Techniques) (FR), Lodz University of Technology (PL), Universitatea Babeş-Bolyai (Facultatea de Fizica) (RO), Kaunas University of Technology (F. Chemical Technology) (LT), University of Vienna, Austria and Charles University, Faculty of Sciences, Czech Republic, etc.

6.4. Eventual informação adicional sobre resultados.

6.4. Eventual informação adicional sobre resultados.

n.a.

6.4. Eventual additional information on results.

n.a.

7. Organização interna e mecanismos de garantia da qualidade

7.1 Existe um sistema interno de garantia da qualidade certificado pela A3ES

7.1. Existe um sistema interno de garantia da qualidade certificado pela A3ES (S/N)?

Se a resposta for afirmativa, a Instituição tem apenas que preencher os itens 7.1.1 e 7.1.2, ficando dispensada de preencher as secções 7.2.

Se a resposta for negativa, a Instituição tem que preencher a secção 7.2, podendo ainda, se o desejar, proceder ao preenchimento facultativo dos itens 7.1.1 e/ou 7.1.2.

Não

7.1.1. Hiperligação ao Manual da Qualidade.

https://www.fct.unl.pt/sites/default/files/manual_da_qualidade_2018.pdf

7.1.2. Anexar ficheiro PDF com o último relatório de autoavaliação do ciclo de estudos elaborado no âmbito do sistema interno de garantia da qualidade (PDF, máx. 500kB).

<sem resposta>

7.2 Garantia da Qualidade

7.2.1. Mecanismos de garantia da qualidade dos ciclos de estudos e das atividades desenvolvidas pelos Serviços ou estruturas de apoio aos processos de ensino e aprendizagem, designadamente quanto aos procedimentos destinados à recolha de informação (incluindo os resultados dos inquéritos aos estudantes e os resultados da monitorização do sucesso escolar), ao acompanhamento e avaliação periódica dos ciclos de estudos, à discussão e utilização dos resultados dessas avaliações na definição de medidas de melhoria e ao acompanhamento da implementação dessas medidas.

A avaliação dos Ciclos de Estudo (CE) assume especial importância para a prossecução da promoção e verificação da qualidade do Ensino e Aprendizagem. Para tal encontram-se descritos em procedimentos os processos de monitorização das Unidades Curriculares (UC) e dos CE. Nestes procedimentos encontram-se bem definidas e especificadas as funções de todos os intervenientes da comunidade académica, nomeadamente estudantes, docentes,

regente e responsável da UC, coordenador e comissão científica (CC) do CE, presidente do departamento responsável pela UC e pelo CE, Subdiretor para os Assuntos Pedagógicos (SAP), Conselho de Gestão (CG) e Diretor.

O processo de monitorização semestral do CE apoia-se em 2 conjuntos de dados sobre as UC:

1) Os dados subjetivos que resultam da perceção dos estudantes e docentes são obtidos através da resposta aos seguintes Questionários de Avaliação das Perceções dos:

- Estudantes sobre o Funcionamento das UC e do Desempenho Global dos Docentes (QA);
- Docentes sobre as UC;
- Estudantes sobre o Desempenho Individual dos Docentes (QB).

2) Os dados objetivos que se referem ao desempenho obtido pelos estudantes nas UC:

- Sucesso escolar;
- Nível de eficiência formativa;
- Média das classificações obtidas pelos estudantes na UC.

O Sistema de Gestão Académica (CLIP) apoia todo o processo de monitorização e avaliação. Os questionários são respondidos online no CLIP, o qual também realiza o tratamento estatístico. Os dados objetivos são extraídos do CLIP. Os relatórios da UC e do CE que integram os dados anteriores são gerados automaticamente pelo CLIP, podendo os diversos intervenientes da comunidade académica aceder online ao respetivo relatório.

Com base nos critérios definidos as UC são classificadas como inadequadas, i.e. UC que necessitam de uma análise mais aprofundada, se o valor médio das respostas a uma das questões do questionário QA se situar abaixo do valor crítico ou se os indicadores de desempenho se situarem abaixo dos limiares críticos definidos.

No final de cada semestre o Coordenador e a CC do CE elaboram o Relatório Semestral do CE o qual inclui (1) a análise dos dados referidos anteriormente, (2) um comentário geral sobre o funcionamento do CE nesse semestre, indicando pontos fortes e pontos fracos e (3) propostas de ações de melhoria ou modificações. Este relatório é analisado pelo SAP e submetido ao CG. Este avalia as propostas e podem sugerir novas ações de melhoria.

As ações de melhoria a implementar devem incluir medidas que permitam corrigir as situações problemáticas. Sempre que surjam situações inadequadas, de cariz repetitivo, deve ser sujeita a um processo de auditoria. Na realização da auditoria, a equipa auditora deve consultar os Responsáveis envolvidos.

Deste processo, resulta um relatório com uma síntese das causas apuradas para o problema e um conjunto de conclusões e recomendações.

O CE é também submetido a uma avaliação (anual) mais detalhada, a qual é sintetizada no Relatório Global de Monitorização do CE.

7.2.1. Mechanisms for quality assurance of the study programmes and the activities promoted by the services or structures supporting the teaching and learning processes, namely regarding the procedures for information collection (including the results of student surveys and the results of academic success monitoring), the monitoring and periodic assessment of the study programmes, the discussion and use of the results of these assessments to define improvement measures, and the monitoring of their implementation.

The evaluation of the Study Cycles is of particular importance for the continuation of the promotion and verification of the Teaching and Learning quality. To this end, the monitoring processes of Curricular Units and Study Cycles are described in procedures. In these procedures, are well defined and specified the functions of all the actors of the academic community, namely students, teachers, regent and responsible of the Curricular Unit, coordinator and scientific commission of the Study Cycle, president of the department responsible for the Curricular Unit and for the Study Cycle, Vice-Dean for Pedagogical Affairs, Management Board and Dean.

The biannual monitoring process of the Study Cycles is based on two sets of data on the Curricular Units:

1) Subjective data that result from the students 'and teachers' perception, and are obtained through the answer to the following Questionnaires of Evaluation of the Perceptions of:

- Students on the Functioning of Curricular Unit and the Global Performance of Teachers (QA);
- Teachers about the Curricular Units;
- Students on the Individual Performance of Teachers (QB).

2) Objective data that refer to the performance achieved by students in the Curricular Units:

- School success;
- Level of formative efficiency;
- Average of the classifications obtained by the students in the Curricular Units.

The Academic Management System (CLIP) supports the entire monitoring and evaluation process. The questionnaires are answered online at the CLIP, which also performs the statistical treatment. The objective data is extracted from the CLIP. The reports of the Curricular Unit and the Study Cycle that integrate the previous data are generated automatically by the CLIP, and the various actors of the academic community can access online the respective report. Based on the criteria defined, the Curricular Units are classified as inadequate, that is, Curricular Units that need further analysis if the average value of the answers to one of the questions in the QA questionnaire is below the critical value, or if the performance indicators are below the defined critical thresholds.

At the end of each semester, the Coordinator and the Scientific Committee of the Study Cycle prepare the Semester Report of the Study Cycle which includes (1) the analysis of the data referred to above, (2) a general comment on the functioning of the Study Cycle in this semester, indicating strengths and weaknesses and (3) proposals for improvement actions or modifications. This report is reviewed by Vice-Dean for Pedagogical Affairs and submitted to the Management Council. It evaluates the proposals and may suggest further improvement actions.

The improvement actions to be implemented should include measures to correct the problem situations. Where there are inappropriate situations of a repetitive nature, they should be subject to an audit procedure. When conducting the audit, the audit team should consult with those responsible.

From this process, a report summarizes the causes of the problem and a set of conclusions and recommendations. The Study Cycle is also subjected to a more detailed (annual) assessment, which is summarized in the Global Study Cycle Monitoring Report.

7.2.2. Indicação da(s) estrutura(s) e do cargo da(s) pessoa(s) responsável(eis) pela implementação dos mecanismos de garantia da qualidade dos ciclos de estudos.

Sendo um processo transversal a toda a instituição, são vários os responsáveis pela implementação dos mecanismos de garantia da qualidade do Ensino, assim:

1-ao nível da UNL:

- Pró-Reitora responsável pela qualidade do ensino;

- Conselho da Qualidade do Ensino da UNL: Assegurar o funcionamento do sistema de garantia da qualidade do ensino na UNL.

2-ao nível da FCT:

-.Diretor: Orientar todas as estruturas orgânicas e funcionais para os princípios da garantia da qualidade.

- Subdiretor responsável pela garantia da qualidade do ensino na FCT NOVA.

- Comissão da Qualidade do Ensino da FCT NOVA: Assegurar o funcionamento do sistema de garantia da qualidade do ensino.

- Coordenador e Comissão Científica do CE e Presidente do Departamento responsável pelo CE e UC: processo de autoavaliação dos ciclos de estudos.

- Divisão de Gestão e Planeamento da Qualidade: Apoiar a implementação de práticas da qualidade.

- Delegados da Qualidade (DQ): Promover a implementação de práticas da qualidade.

7.2.2. Structure(s) and job role of person(s) responsible for implementing the quality assurance mechanisms of the study programmes.

Being a transversal process to the whole institution, there are several responsible for the implementation of the Teaching quality assurance mechanisms, thus:

1- at UNL level:

- Pro-Rector responsible for teaching quality;

- Teaching Quality Council of UNL: Ensure the functioning of NOVA's Teaching Quality Assurance System.

2- at FCT level:

- Dean: To guide all organic and functional structures in accordance with the principles of quality assurance.

- Vice-Dean responsible for Teaching quality assurance at FCT NOVA.

- FCT NOVA Teaching Quality Committee: Ensure the functioning of the teaching quality assurance system.

- Coordinator and Scientific Committee of the CE and Chair of the Department responsible for the EC and UC: process of self-evaluation of study cycles.

- Planning and Quality Management Division (DPGQ): Support the implementation of quality practices.

- Quality Delegates (DQ): Promote the implementation of quality practices.

7.2.3. Procedimentos de avaliação do desempenho do pessoal docente e medidas conducentes à sua permanente atualização e desenvolvimento profissional.

O Regulamento da FCT NOVA relativo à Avaliação do Desempenho (RAD) têm por objeto o desempenho dos docentes, visando avaliá-lo em função do mérito e melhorar a sua qualidade. A avaliação de desempenho abrange todos os docentes das escolas envolvidas, tem em conta a especificidade de cada área disciplinar e considera todas as vertentes da respetiva atividade: a) Docência; b) Investigação científica, desenvolvimento e inovação; c) Tarefas administrativas e de gestão académica; d) Extensão universitária, divulgação científica e prestação de serviços à comunidade. Os resultados da avaliação têm consequências no posicionamento remuneratório, contratação por tempo indeterminado e renovações de contratos. Para a permanente atualização dos docentes contribui, desde logo, a implementação de uma política de estímulo à investigação de qualidade com o objetivo de incentivar projetos com potencial de investigação e reconhecer o mérito dos investigadores mais destacados.

7.2.3. Procedures for the assessment of teaching staff performance and measures for their continuous updating and professional development.

The FCT NOVA Regulation on Performance Assessment (RAD) are aimed at the performance of the teachers, in order to assess it on the basis of merit and to improve its quality. The performance evaluation covers all the teachers of the schools involved, takes into account the specificity of each subject area and considers all aspects of their activity: a) Teaching; (b) scientific research, development and innovation; c) Administrative and academic management tasks; d) University extension, scientific dissemination and service delivery to the community. The results of the evaluation have consequences on the remuneration positioning, contract renewals and tenure. For the permanent updating of the teaching staff, it mainly contributes the implementation of a policy to stimulate research quality with the goal of encouraging projects with research potential and recognizing the merit of the most outstanding researchers.

7.2.3.1. Hiperligação facultativa ao Regulamento de Avaliação de Desempenho do Pessoal Docente.

<https://dre.pt/application/conteudo/107752661>

7.2.4. Procedimentos de avaliação do pessoal não-docente e medidas conducentes à sua permanente atualização e desenvolvimento profissional.

A avaliação do pessoal não docente é efetuada segundo o SIADAP – Sistema Integrado de Avaliação de Desempenho da Função Pública – o qual assenta na definição de objetivos institucionais que são desdobrados pela organização. Os objetivos a atingir por cada funcionário, administrativo ou técnico, são definidos no início de cada biénio e estão alinhados com os objetivos estratégicos da instituição. A progressão do funcionário, a existir, dependerá da avaliação bienal que é feita em função do cumprimento das metas fixadas.

7.2.4. Procedures for the assessment of non-academic staff performance and measures for their continuous updating and professional development.

The performance of non-academic staff is based on SIADAP – Integrated System for Performance Evaluation of Public Administration. SIADAP requires the definition and deployment of institutional objectives. The goals to be attained by the non-academic staff are aligned with the institution strategic objectives and are defined at the beginning of each

biennium. The career progression of staff depends on their biennial evaluation, which is based on the degree of accomplishment of the pre-defined goals.

7.2.5. Forma de prestação de informação pública sobre o ciclo de estudos.

O ciclo de estudos é apresentado ao público de diferentes formas, nomeadamente:

Site da FCT-UNL (<https://www.fct.unl.pt/ensino/curso/mestrado-em-quimica-bioorganica>), onde constam as condições de acesso, os objetivos e saídas profissionais, bem como um link para uma página do mestrado onde os candidatos podem encontrar outras informações como temas de dissertação de mestrado, testemunhos de antigos estudantes assim como outros anúncios.

No dia aberto da FCT nova, EXPO-FCT, demonstração de experiências da área e contacto direto com docentes e investigadores.

Em todas as actividades são distribuídos panfletos informativos e acompanhamento.

7.2.5. Means of providing public information on the study programme.

The cycle of studies is presented to the public in different ways, namely:

FCT-UNL website (<https://www.fct.unl.pt/ensino/curso/Master-em-quimica-bioorganica>), which contains the conditions of access, the objectives and the professional exits, as well as a link to a Master's page where applicants can find other information such as Master's thesis topics, alumni testimonials as well as other advertisements.

On the open day of FCT NOVA, EXPO-FCT, demonstration of experiences and direct contact with teachers and researchers.

In all activities information leaflets and follow-up are distributed.

7.2.6. Outras vias de avaliação/acreditação nos últimos 5 anos.

n.a.

7.2.6. Other assessment/accreditation activities over the last 5 years.

n.a.

8. Análise SWOT do ciclo de estudos e proposta de ações de melhoria

8.1 Análise SWOT global do ciclo de estudos

8.1.1. Pontos fortes

Para a análise SWOT foi realizado um inquérito a todos os antigos e atuais estudantes do MQBO. Nas respostas ao inquérito os estudantes indicam como pontos fortes do mestrado os seguintes aspetos:

- *Ser um mestrado com horas de contacto em horário “pós-laboral” das 17 h às 20 h30 m.*
- *Ter um leque de disciplinas interessante e focado em Química Orgânica que permite uma consolidação das bases de Química Orgânica.*
- *Diversidade de unidades curriculares que permitem compreender a aplicação da Química Orgânica nas mais variadas áreas.*
- *Diversidade de unidades curriculares obrigatórias que permite uma formação alargada em química.*
- *Diversidade de currículo, embora focado sempre na Química Orgânica, é considerado que a interface com os métodos analíticos está muito bem conseguido.*
- *Diversidade da oferta de unidades curriculares optativas.*
- *A componente prática e a abordagem de uma prestativa farmacêutica.*
- *Acesso a plataformas eletrónicas de pesquisa bibliográfica (WoS, B-on, Scopus, Reaxys)*
- *Possibilitar a realização de dissertação fora da instituição.*
- *Disponibilização dos laboratórios de investigação para a realização de parte experimental.*
- *Disponibilidade, acessibilidade e dedicação dos docentes aos estudantes do mestrado.*
- *Capacidade da coordenação do mestrado em resolver da melhor maneira situações adversas que surgem aos estudantes.*

8.1.1. Strengths

For the SWOT analysis, a survey was conducted to all current and former MQBO students. In the responses to the survey students indicate as strengths of the Master the following aspects:

- *The master's schedule from in “post-work” time from 17 pm to 20:30 pm.*
- *Have an interesting and focused Organic Chemistry disciplines that allows to consolidate the foundations of Organic Chemistry.*
- *Diversity of curricular units that allow us to understand the application of Organic Chemistry in the most varied areas.*
- *Diversity of compulsory course units allowing for a broad background in chemistry.*
- *Curriculum diversity, although always focused on Organic Chemistry, is considered to have a very good interface with analytical methods.*
- *Diversity of offer of optional curricular units.*
- *The practical component and approach of a pharmaceutical provider.*
- *Access to electronic bibliographic search platforms (WoS, B-on, Scopus, Reaxys).*
- *Enable the realization of dissertation outside the institution.*

- *Availability of research laboratories to carry out experimental part.*
- *Availability, accessibility and dedication of teachers to master students.*
- *Master's coordination ability to best solve adverse situations that arise to students.*

8.1.2. Pontos fracos

Para a análise SWOT foi realizado um inquérito a todos os antigos e atuais estudantes do MQBO. Nas respostas ao inquérito houve estudantes que referiram que não viam pontos fracos no mestrado e estudantes que indicam como pontos fracos os seguintes aspetos:

1. *Capítulos curriculares avançados para alunos com licenciaturas de outras instituições. Apontam o interesse na criação de um bloco intensivo de revisão de conceitos de Química Orgânica, de Química Física e de Química Computacional.*
2. *Sobreposição de tópicos em diferentes unidades curriculares.*
3. *É referida a repetição de alguns tópicos já lecionados na licenciatura (LQA/FCT) mas é também referida a compreensão de tal facto devido ao acompanhamento que tem que ser dado a estudantes que vieram de fora da instituição.*
4. *Ligação à indústria inexistente durante o 1º ano do mestrado.*

8.1.2. Weaknesses

For the SWOT analysis, a survey was conducted to all current and former MQBO students. In the survey responses there were students who reported that they did not see weaknesses in the master's degree and students who indicated as weaknesses the following aspects:

1. *Advanced curriculum chapters for students with degrees from other institutions. They point out the interest in the creation of an intensive block of revision of concepts of Organic Chemistry, Physical Chemistry and Computational Chemistry.*
2. *Overlapping topics in different curricular units.*
3. *It is mentioned the repetition of some topics already taught in the degree (LQA / FCT) but also the understanding of this fact due to the accompaniment that has to be given to students who came from outside the institution.*
4. *Non-existent links to industry during first year of master's degree.*

8.1.3. Oportunidades

- *A formação alargada em química do MQBO permite aos alunos terem uma visão consciente das áreas do conhecimento lecionadas e optar pela que têm mais apetência para que possam fazer uma escolha adequada dos temas de tese de mestrado.*
- *Abertura dos laboratórios do departamento para a realização das teses de mestrado que se incluem nas áreas de investigação dos docentes do mestrado e outros investigadores.*
- *Possibilidade de realizar o trabalho para tese de mestrado noutras instituições de investigação e também na indústria. Esta possibilidade permite o contacto efetivo do aluno com o mercado de trabalho, uma maior apetência para a integração em laboratórios empresariais e por vezes a porta de entrada para a contratação pelas empresas.*
- *Durante o período letivo são apresentados seminários por peritos em diferentes áreas de especialidade que são considerados uma mais valia por parte dos alunos.*
- *Enriquecimento do currículo do aluno pela sua inclusão como autor nas várias formas de difusão de ciência sobre os trabalhos de investigação que desenvolve.*
- *O mestrado permite a aquisição de conhecimentos adequada à fácil progressão numa carreira profissional.*

8.1.3. Opportunities

- *Extensive chemistry training enables students of the MQBO to have a conscious view of the areas of knowledge taught and to choose the one they are most keen to make in order to make an appropriate choice of master's thesis topics.*
- *Opening of the department's laboratories for the realization of master's theses that are included in the research areas of master's teachers and other researchers.*
- *Possibility to do the master thesis work in other research institutions and also in industry. This enables effective student contact with the job market, greater willingness to integrate into business labs and sometimes the gateway to hiring companies.*
- *Seminars are presented during the academic year by experts in different areas of expertise that are considered an asset by the students.*
- *Enrichment of the student's curriculum by including him as an author in the various forms of science diffusion about the research work he develops.*
- *The master's degree enables the acquisition of knowledge appropriate to the easy progression in a professional career.*

8.1.4. Constrangimentos

Os constrangimentos apontados ao MQBO são essencialmente consequência da dificuldade de apoio financeiro.

- *Em alguns casos a ausência de apoio financeiro limita a mobilidade dos estudantes para a realização do trabalho experimental para a tese quando a instituição exterior se localiza longe da área de residência do estudante. Também foi apontada a consequente dificuldade de deslocação a conferências uma vez que a instituição não dá apoio económico para este tipo de deslocações, que só ocorrem quando os investigadores responsáveis disponibilizam verba dos seus próprios projetos.*

8.1.4. Threats

The constraints pointed to the MQBO are essentially a consequence of the difficulty of financial support. In some cases the lack of financial support limits students' mobility to carry out experimental work for the thesis when the outside institution is located far from the student's area of residence. It was also pointed out the consequent difficulty of traveling to conferences since the institution does not provide economic support for such trips, which only occur when the responsible researchers provide funds from their own projects.

8.2. Proposta de ações de melhoria

8.2. Proposta de ações de melhoria

8.2.1. Ação de melhoria

1. *Incentivar a procura de apoio tutorial pelos estudantes com formação em QO, Química computacional ou Análise estrutural mais deficitária.*
2. *Articular os conteúdos programáticos entre as várias UC do mestrado para minimizar repetições não produtivas.*
3. *Verificar em que medida a repetição de alguns tópicos já lecionados na licenciatura (LQA/FCT) possa ser minimizada num tempo mais reduzido e compactado.*
4. *Programar visitas de estudo a empresas/laboratórios profissionais.*

8.2.1. Improvement measure

1. *Encourage the search for tutorial support by students with a deficient background in OQ, Computational Chemistry or Structural Analysis.*
2. *Articulate the syllabus between the various master's UCs to minimize non-productive repetitions.*
3. *Check to what extent the repetition of some topics already taught in the degree (LQA / FCT) can be minimized in a shorter time and compressed.*
4. *Schedule study visits to companies / professional laboratories.*

8.2.2. Prioridade (alta, média, baixa) e tempo de implementação da medida

1. *Alta – estabelecer com o corpo docente um horário de apoio tutorial aos estudantes. A implementar já a partir do próximo ano letivo 2020/21*
- 2 e 3. *Alta - Medida a implementar-se já no ano letivo de 2020/21*
4. *Média - Medida a implementar-se já no ano letivo de 2020/21*

8.2.2. Priority (high, medium, low) and implementation time.

1. *High - Establish with the faculty a tutorial support schedule for students. To be implemented as of next school year 2020/21*
- 2 and 3. *High - Measure to be implemented as early as 2020/21*
4. *Average - Measure to be implemented as early as the 2020/21 school year.*

8.1.3. Indicadores de implementação

Medidas 1 e 2

- Inquéritos aos estudantes e docentes

Medida 1 a 3

- Indicadores recolhidos através do processo de monitorização da qualidade da FCT NOVA

- Reunião anual da Comissão Pedagógica que inclui dois docentes e dois representantes dos estudantes

Medida 4

Aumentar do número de estudantes a realizar teses em empresas/laboratórios profissionais.

8.1.3. Implementation indicator(s)

Measures 1 and 2

- Student and teacher surveys

Measure 1 to 3

- Indicators collected through the FCTNOVA quality monitoring process

- Annual meeting of the Pedagogical Commission which includes two teachers and two representatives student.

Measure 4

Increasing number of students taking tests in professional companies / labs

9. Proposta de reestruturação curricular (facultativo)

9.1. Alterações à estrutura curricular

9.1. Síntese das alterações pretendidas e respectiva fundamentação

O estabelecimento de um acordo de cooperação internacional sobre a implementação de um programa conjunto de estudos levando à emissão de um duplo diploma de mestrado com a Universidade de Estrasburgo, permite a implementação de um programa educacional moderno, baseado na experiência no ensino de química,

quimioinformática e modelagem molecular. O programa de estudo conjunto é baseado nos graus de segundo ciclo locais e dois anos:

- *Mestrado em Ciências e Tecnologia, grau em Química, ramo Quimioinformática na UNISTRA;*
- *Mestrado em Química Bioorgânica na FCT NOVA.*

Este acordo alargou o leque do plano de estudos para incluir (no caso de o estudante optar pelo duplo diploma) duas unidades optativas no plano de estudo no 2.º semestre, da área científica de Informática, Introdução à Programação e Bases de Dados. O 3º semestre será realizado em Estrasburgo e contempla um conjunto de unidades curriculares oferecidas pela UNISTRA. O 4º semestre corresponde à tese de mestrado, de 30 ECTS.

Para quem não opta pelo duplo grau, terá de realizar a dissertação anual de 60 ECTS.

9.1. Synthesis of the proposed changes and justification.

The establishment of an international cooperation agreement on the implementation of a joint study program leading to the issuance of a dual master's degree with the University of Strasbourg allow the implementation of a modern educational program based on experience in chemistry, chemoinformatics and molecular modeling. The joint study program is based on

the local two-year second cycle degrees:

- *Master in Science and Technology, degree in Chemistry, Chemistry area at UNISTRA;*
- *Master in Bioorganic Chemistry at UNL.*

This establishment has broadened the scope of the study plan to include (in case the student chooses the Master double degree) two optional units from the scientific area de Informatics in the study plan in the 2nd semester, Introduction to Programming and Databases. The 3rd semester will be held in Strasbourg and includes a set of curricular units offered by UNISTRA. The 4th semester corresponds to the master's thesis.

For those who do not choose the dual master's degree, will have to perform the annual dissertation of 60 ECTS.

9.2. Nova estrutura curricular pretendida (apenas os percursos em que são propostas alterações)

9.2.

9.2.1. Ramo, opção, perfil, maior/menor ou outra (se aplicável):

<sem resposta>

9.2.1. Branch, option, profile, major/minor or other (if applicable).

<no answer>

9.2.2. Áreas científicas e créditos necessários à obtenção do grau / Scientific areas and number of credits to award the degree

Área Científica / Scientific Area	Sigla / Acronym	ECTS Obrigatórios / Mandatory ECTS	ECTS Optativos / Optional ECTS*	Observações / Observations
Química / Chemistry	Q	105	0	
Competências Complementares / Transferable Skills	CC	3	0	
Química/Bioquímica/Eng. Química/Eng. Sanitária/Segurança Alimentar/Informática/Chemistry/Biochemistry /Chemical Eng/Sanitary Eng/Food Safety/Informatics	Q / Bq / EQ / ES / SA / I	0	6	
Qualquer Área Científica / Any Scientific Area	QAC	0	6	
(4 Items)		108	12	

9.3. Plano de estudos

9.3. Plano de estudos - - 1.º Ano

9.3.1. Ramo, variante, área de especialização do mestrado ou especialidade do doutoramento (se aplicável):

<sem resposta>

9.3.1. Branch, option, specialization area of the master or speciality of the PhD (if applicable):

<no answer>

9.3.2. Ano/semestre/trimestre curricular:

1.º Ano

9.3.2. Curricular year/semester/trimester:

1st Year

9.3.3 Plano de estudos / Study plan

Unidades Curriculares / Curricular Units	Área Científica / Scientific Area (1)	Duração / Duration (2)	Horas Trabalho / Working Hours (3)	Horas Contacto / Contact Hours (4)	ECTS	Observações / Observations (5)
Bioorgânica Analítica / Analytical Bioorganic	Q	Semestre 1	168	TP:14; PL:42	6	
Química Medicinal / Medicinal Chemistry	Q	Semestre 1	168	T: 50	6	
Química Orgânica Assimétrica I / Asymmetric Organic Chemistry I	Q	Semestre 1	168	T: 35; PL:15	6	
Química Orgânica Física / Physical Organic Chemistry	Q	Semestre 1	84	TP: 28	3	
Unidade Curricular do Bloco Livre / Unrestricted Elective	QAC	Semestre 1	168	depende da UC escolhida / dependent of choice	6	Optativa / Optional
Bioorgânica Estrutural / Structural Bioorganic Chemistry	Q	Semestre 2	168	T: 35; PL:10; S:5	6	
Controle de Qualidade em Laboratório / Laboratory Quality Control	Q	Semestre 2	84	T:14; TP:14	3	
Química Computacional Aplicada / Applied Computational Chemistry	Q	Semestre 2	168	T: 45; S: 5	6	
Química Orgânica Assimétrica II / Asymmetric Organic Chemistry II	Q	Semestre 2	168	T:25; TP:25	6	
Síntese Orgânica Aplicada / Applied Organic Synthesis	Q	Semestre 2	84	PL: 20, S:8	3	
Opção 1 / Option 1	Q / Bq / EQ / ES / SA / INF	Semestre 2	168	depende da UC escolhida / dependent of choice	6	Optativa / Optional
Empreendedorismo / Entrepreneurship	CC	Trimestre 2	80	TP:45	3	

(12 Items)

9.3. Plano de estudos - - 1.º Ano – Grupo de Opções 1

9.3.1. Ramo, variante, área de especialização do mestrado ou especialidade do doutoramento (se aplicável):
<sem resposta>

9.3.1. Branch, option, specialization area of the master or speciality of the PhD (if applicable):
<no answer>

9.3.2. Ano/semestre/trimestre curricular:
1.º Ano – Grupo de Opções 1

9.3.2. Curricular year/semester/trimester:
1st Year - Option Group 1

9.3.3 Plano de estudos / Study plan

Unidades Curriculares / Curricular Units	Área Científica / Scientific Area (1)	Duração / Duration (2)	Horas Trabalho / Working Hours (3)	Horas Contacto / Contact Hours (4)	ECTS	Observações / Observations (5)
Bioquímica Clínica / Clinical Biochemistry	Bq	Semestre 2	168	T:24; TP:14; S:10; OT:5	6	Optativa / Optional
Metais em Biologia e Medicina / Metals in Biology and Medicine	Bq	Semestre 2	168	T: 24; TP: 14; S: 10; OT: 5	6	Optativa / Optional
Ciência dos Polímeros / Polymer Science	EQ	Semestre 2	168	T:42; PL:18; S:3	6	Optativa / Optional
Tecnologias e Processos Químicos / Technologies and Chemical Processes	EQ	Semestre 2	168	TP:56	6	Optativa / Optional
Sistemas de Tratamento de Águas Residuais e Efluentes / Treatment of Municipal and Industrial Wastewaters	ES	Semestre 2	168	T:28; PL:42	6	Optativa / Optional
Fotoquímica / Photochemistry	Q	Semestre 2	168	T:28; TP:12; PL:20	6	Optativa / Optional
Química Forense / Forensic Chemistry	Q	Semestre 2	168	T: 28; PL:20	6	Optativa / Optional

Química sob Radiação / Radiation Chemistry	Q	Semestre 2	168	T: 22; TP:23; S:5	6	Optativa / Optional
Toxicologia Alimentar / Food Toxicology	SA	Semestre 2	168	T:28; PL:42	6	Optativa / Optional
Bases de Dados / Databases	I	Semestre 2	168	T: 42; PL:24	6	Optativa / Optional
Introdução à Programação (B) / Introduction to Programming (11 Items)	I	Semestre 2	168	T:28; PL:42	6	Optativa / Optional

9.3. Plano de estudos - - 2.º Ano

9.3.1. Ramo, variante, área de especialização do mestrado ou especialidade do doutoramento (se aplicável):
<sem resposta>

9.3.1. Branch, option, specialization area of the master or speciality of the PhD (if applicable):
<no answer>

9.3.2. Ano/semestre/trimestre curricular:
2.º Ano

9.3.2. Curricular year/semester/trimester:
2nd Year

9.3.3 Plano de estudos / Study plan

Unidades Curriculares / Curricular Units	Área Científica / Scientific Area (1)	Duração / Duration (2)	Horas Trabalho / Working Hours (3)	Horas Contacto / Contact Hours (4)	ECTS	Observações / Observations (5)
Opção Avançada de Formação / Advanced Training Option (1 Item)	Q	Anual / Annual	1680	depende da UC escolhida / dependent of choice	60	Optativa / Optional

9.3. Plano de estudos - - 2.º Ano - Grupo Opção Avançada de Formação

9.3.1. Ramo, variante, área de especialização do mestrado ou especialidade do doutoramento (se aplicável):
<sem resposta>

9.3.1. Branch, option, specialization area of the master or speciality of the PhD (if applicable):
<no answer>

9.3.2. Ano/semestre/trimestre curricular:
2.º Ano - Grupo Opção Avançada de Formação

9.3.2. Curricular year/semester/trimester:
2nd Year - Advanced Training Option Group

9.3.3 Plano de estudos / Study plan

Unidades Curriculares / Curricular Units	Área Científica / Scientific Area (1)	Duração / Duration (2)	Horas Trabalho / Working Hours (3)	Horas Contacto / Contact Hours (4)	ECTS	Observações / Observations (5)
Dissertação em Química Bioorgânica / Master Thesis in Bioorganics Chemistry	Q	Anual / Annual	1680	OT: 56	60	Optativa / Optional
UC oferecidas pela UNISTRA / UC offered by UNISTRA	Q	Semestre 1	549	T: 16; TP: 78; OT: 56	30	Optativa / Optional
Dissertação em Química Bioorgânica / Master Thesis in Bioorganics Chemistry (3 Items)	Q	Semestre 2	840	OT: 28	30	Optativa / Optional

9.3. Plano de estudos - - 2.º Ano – UC oferecidas pela UNISTRA

9.3.1. Ramo, variante, área de especialização do mestrado ou especialidade do doutoramento (se aplicável):
<sem resposta>

9.3.1. Branch, option, specialization area of the master or speciality of the PhD (if applicable):
<no answer>

9.3.2. Ano/semestre/trimestre curricular:
2.º Ano – UC oferecidas pela UNISTRA

9.3.2. Curricular year/semester/trimester:
2nd Year - UC offered by UNISTRA

9.3.3 Plano de estudos / Study plan

Unidades Curriculares / Curricular Units	Área Científica / Scientific Area (1)	Duração / Duration (2)	Horas Trabalho / Working Hours (3)	Horas Contacto / Contact Hours (4)	ECTS	Observações / Observations (5)
Chemoinformatics I	Q	Semestre 1	51	T: 16; OT:8	3	
Chemoinformatics II	Q	Semestre 1	51	T: 16; OT:8	3	
Chemoinformatics III	Q	Semestre 1	51	T: 16; OT:8	3	
Data Mining Methods	Q	Semestre 1	51	TP: 24	3	
Drug Discovery	Q	Semestre 1	51	T: 16; OT:8	3	
Structured Based Drug Design	Q	Semestre 1	51	T: 16; OT:8	3	
Structural Biology and Molecular Modelling	Q	Semestre 1	64	T: 16; OT:8	3	
Molecular Dynamics Simulations	Q	Semestre 1	64	TP: 24	3	
Quantum Chemistry	Q	Semestre 1	64	T: 16; OT:8	3	
Internet Technology	Q	Semestre 1	51	TP:30	3	

(10 Items)

9.4. Fichas de Unidade Curricular**Anexo II - Drug Discovery**

9.4.1.1. Designação da unidade curricular:
Drug Discovery

9.4.1.1. Title of curricular unit:
Drug Discovery

9.4.1.2. Sigla da área científica em que se insere:
Q

9.4.1.3. Duração:
Semestral / Semester

9.4.1.4. Horas de trabalho:
51

9.4.1.5. Horas de contacto:
T:16; OT:8

9.4.1.6. ECTS:
3

9.4.1.7. Observações:
<sem resposta>

9.4.1.7. Observations:*<no answer>***9.4.2. Docente responsável e respetiva carga lectiva na unidade curricular (preencher o nome completo):***Prof. Marcel HIBERT – T:16; OT:8***9.4.3. Outros docentes e respetivas cargas lectivas na unidade curricular:***<sem resposta>***9.4.4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):***Competências a adquirir:*

- *Conhecimento geral de estratégias e métodos para identificação e otimização de substâncias ativas;*
- *Conhecimento da indústria farmacêutica e R&D;*
- *Identificação das diferentes fases do processo de pesquisa, integrando requisitos de entrada e objetivos do processo. Posicionamento dentro deste processo.*

9.4.4. Learning outcomes of the curricular unit:*Skills to acquire:*

- *General knowledge of strategies and methods for identification and optimization of active substances;*
- *Knowledge of the pharmaceutical industry and R & D;*
- *Identification of the different phases of the research process by integrating entry requirements and process objectives. Positioning within this process.*

9.4.5. Conteúdos programáticos:

1 - Introdução à natureza química das substâncias ativas (pequenas moléculas sintéticas, produtos naturais, biomedicina de biotecnologias); natureza química das interações com alvos biológicos (H, iónicas, hidrofóbicas, covalentes).

2 - O mundo da medicina

Política de descoberta e desenvolvimento de medicamentos, pesquisa pré-clínica e clínica.

3 - Génese de substâncias ativas

- *Descoberta de medicamentos: recursos naturais, descobertas ao acaso, triagem, quimiogenómica, design racional*
- *Hit to Lead: otimização*
- *Inibidores enzimáticos recentes de drogas: concepção, mecanismos.*
- *Consideração antecipada das propriedades físico-químicas, ADMETox*
- *Gestão do ciclo de vida do medicamento: mudança quiral, polimorfos, hidratos, solvatos ...*
- *Produção: Sínteses em larga escala, síntese total, semi-síntese, outsourcing.*
- *Produção por biotecnologia e biomedicina: princípios fundamentais*
- *Extrações: principais princípios da fitoquímica*
- *Controle de substâncias ativas*

9.4.5. Syllabus:

1 - Introduction to the chemical nature of the active substances (synthetic small molecules, natural products, biomedicines from biotechnologies); chemical nature of interactions with biological targets (H, ionic, hydrophobic, covalent).

2 - The world of medicine

Drug discovery and development policy, Pre-clinical and clinical research.

3 - Genesis of Active Substances

- *Drug Discovery: natural resources, chance discoveries, screening, chemogenomics, rational design*
- *Hit to Lead: Key optimization*
- *Recent enzymatic drug-inhibitors: conception, mechanisms.*
- *Early consideration of the physicochemical properties, ADMETox*
- *Management of the drug's life cycle: chiral switch, polymorphs, hydrates, solvates ...*
- *Production: Syntheses on a large scale, total synthesis, semi synthesis, outsourcing, counter-manners.*
- *Biotechnology and Biomedicine Production: Key Principles*
- *Extractions: main principles of phytochemistry*
- *Control of Active Substances*

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

- *Conhecimento geral de estratégias e métodos para identificação e otimização de substâncias ativas;*
- *Descoberta de medicamentos: recursos naturais, descobertas ao acaso, triagem, quimiogenómica, design racional*
- *Conhecimento da indústria farmacêutica e R&D;*
- *Política de descoberta e desenvolvimento de medicamentos, pesquisa pré-clínica e clínica.*
- *Identificação das diferentes fases do processo de pesquisa, integrando requisitos de entrada e objetivos do processo. Posicionamento dentro deste processo.*
- *Hit to Lead: otimização*
- *Inibidores enzimáticos recentes de drogas: concepção, mecanismos.*
- *Consideração antecipada das propriedades físico-químicas, ADMETox*

*Gestão do ciclo de vida do medicamento: mudança quiral, polimorfos, hidratos, solvatos ...
Produção: Sínteses em larga escala, síntese total, semi-síntese, outsourcing.*

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

- *General knowledge of strategies and methods for identification and optimization of active substances; Drug discovery and development policy, Pre-clinical and clinical research.*
 - *Knowledge of the pharmaceutical industry and R & D; Drug discovery and development policy, Pre-clinical and clinical research.*
 - *Identification of the different phases of the research process by integrating entry requirements and process objectives. Positioning within this process.*
- Hit to Lead: Key optimization*
Recent enzymatic drug-inhibitors: conception, mechanisms.
Early consideration of the physicochemical properties, ADMETox
Management of the drug's life cycle: chiral switch, polymorphs, hydrates, solvates ...
Production: Syntheses on a large scale, total synthesis, semi synthesis, outsourcing, counter-manners.

9.4.7. Metodologias de ensino (avaliação incluída):

O curso é ministrado com aulas teóricas e sessões práticas.

9.4.7. Teaching methodologies (including evaluation):

- *The Practice of Medicinal Chemistry, by Camille-Georges Wermuth, Elsevier Ed.*

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

Sessões práticas

PL 1: Os mundos farmacêuticos: grandes empresas farmacêuticas, start-ups, pesquisa pública, como encontrar o lugar de alguém, como fazer o seu caminho?

PL 2 e 3: comentários das publicações tipo J Med Chem, TD para elaboração e correção coletiva.

PL 4: trabalho em biotecnologia local (descoberta e produção de substâncias ativas). Objetivo: identificar bases de treino e contratação.

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

Practical sessions

PL 1: The pharmaceutical worlds: Big Pharma, start-ups, public research, how to find one's place, how to make its way?

PL 2 and 3: comments of publications type J Med Chem, TD to prepare and collective correction.

PL 4: work on local biotech (discovery and production of active substances). Objective: to identify training and hiring grounds.

9.4.9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória:

- *The Practice of Medicinal Chemistry, by Camille-Georges Wermuth, Elsevier Ed.*

Anexo II - Structural Biology and Molecular Modelling

9.4.1.1. Designação da unidade curricular:

Structural Biology and Molecular Modelling

9.4.1.1. Title of curricular unit:

Structural Biology and Molecular Modelling

9.4.1.2. Sigla da área científica em que se insere:

Q

9.4.1.3. Duração:

Semestral / Semester

9.4.1.4. Horas de trabalho:

64

9.4.1.5. Horas de contacto:

T:16; OT:8

9.4.1.6. ECTS:

3

9.4.1.7. Observações:

<sem resposta>

9.4.1.7. Observations:

<no answer>

9.4.2. Docente responsável e respetiva carga lectiva na unidade curricular (preencher o nome completo):

Marco CECCHINI – T:8; OT:8

9.4.3. Outros docentes e respetivas cargas lectivas na unidade curricular:

Roland Stöte – T:8; OT:8

9.4.4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):

O objetivo do curso é apresentar conceitos avançados e aplicações da química teórica nas ciências da vida. Apresenta métodos modernos de modelação molecular para responder aos desafios da biologia estrutural. Esses métodos serão ilustrados em vários exemplos de modelação de sistemas biológicos complexos e suas interações com pequenas moléculas e macromoléculas.

9.4.4. Learning outcomes of the curricular unit:

The aim of the teaching is to present advanced concepts and applications of theoretical chemistry in the life sciences. It presents modern methods of molecular modeling to answer the challenges of structural biology. These methods will be illustrated on numerous examples of modeling of complex biological systems and their interactions with small molecules and macromolecules.

9.4.5. Conteúdos programáticos:

Introdução às estruturas de proteínas e ácidos nucleicos; relação entre estrutura, dinâmica e função; Interações macromoleculares; Modelação molecular de sistemas biológicos complexos de múltiplas escalas: simulações coarse-grain. Aplicação desses conceitos à modelação de biomoléculas por mecânica molecular com introdução ao software de modelação.

9.4.5. Syllabus:

Introduction to the structures of proteins and nucleic acids; relationship between structure, dynamics and function; Macromolecular interactions; Molecular modeling of complex, multi-scale biological systems: coarse-grain simulations. To be able to apply these concepts to biomolecule modeling by molecular mechanics with introduction to modeling software and their use.

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

Os alunos ganharão competências teóricas e práticas avançadas em química física e computacional na interface com a biologia.

- Tratar modelos de macromoléculas.

Modelação molecular de sistemas biológicos complexos de múltiplas escalas: simulações coarse-grain.

- Confrontar os resultados das simulações com os dados experimentais.

relação entre estrutura, dinâmica e função

- Propor melhorias para os modelos existentes.

Aplicação desses conceitos à modelação de biomoléculas usando mecânica molecular

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

Students will gain advanced theoretical and practical skills in physical and computer chemistry at the interface with biology.

- Treat models of macromolecules.

Molecular modeling of complex, multi-scale biological systems: coarse-grain simulations.

- Confront the results of simulations with the experimental data.

relationship between structure, dynamics and function

- Propose improvements to existing models.

Application of these concepts to biomolecule modeling using molecular mechanics

9.4.7. Metodologias de ensino (avaliação incluída):

Os cursos são divididos em sessões teóricas e práticas. A avaliação é um exame escrito de 2 horas sem consulta.

9.4.7. Teaching methodologies (including evaluation):

The courses are divided into theoretical and practical sessions. The evaluation is a written examination during 2 hours without documents.

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

As aulas de computadores são a ocasião para os alunos colocarem em prática os conceitos apresentados durante as aulas teóricas. O exame final é o momento de avaliar as competências e conhecimentos dos alunos.

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

The computer classes are the occasions for the students to put in practices the concepts presented during the theoretical lectures. The final examination is the time to evaluate the skills and knowledge of the students.

9.4.9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória:

1. Leach, A. R., & Leach, A. R. (2001). *Molecular modelling: principles and applications*. Pearson education.
2. Branden, C. I., & Tooze, J. (2012). *Introduction to protein structure*. Garland Science.
3. Monticelli, L., & Salonen, E. (Eds.). (2013). *Biomolecular simulations: methods and protocols* (Vol. 924, pp. 197-213). Humana Press.

Anexo II - Chemoinformatics I

9.4.1.1. Designação da unidade curricular:

Chemoinformatics I

9.4.1.1. Title of curricular unit:

Chemoinformatics I

9.4.1.2. Sigla da área científica em que se insere:

Q

9.4.1.3. Duração:

Semestral / Semester

9.4.1.4. Horas de trabalho:

51

9.4.1.5. Horas de contacto:

T:16; OT:8

9.4.1.6. ECTS:

3

9.4.1.7. Observações:

<sem resposta>

9.4.1.7. Observations:

<no answer>

9.4.2. Docente responsável e respetiva carga lectiva na unidade curricular (preencher o nome completo):

Prof. Alexandre VARNEK – T:16; OT:8

9.4.3. Outros docentes e respetivas cargas lectivas na unidade curricular:

Gilles MARCOU – OT:8

9.4.4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):

No final do curso, o aluno deverá ser capaz de:

Criar e / ou gerir bases de dados químicos usando software apropriado.

Escolher e usar métodos relevantes para processamento de dados e validação de dados químicos

Encontrar informações químicas relevantes (procura por subestrutura e por similaridade).

9.4.4. Learning outcomes of the curricular unit:

By the end of the course the student should be able to:

Create and/or manage chemical databases using dedicated software

Chose and use relevant methods for data processing and curation of chemical data

Find relevant chemical information (search by substructure and by similarity).

9.4.5. Conteúdos programáticos:

Elementos básicos da teoria de grafos. Tabelas de conectividade e notações lineares. SMILES e código InChi. Impressões digitais moleculares. Farmacóforo. Formatos MOL, SDF, RXN e RDF. Pesquisa por estrutura, subestrutura e similaridade. Análise conformacional. Critérios de similaridade (Tanimoto, Dice e Tversky). Métricas Euclidiana e Manhattan. Ferramentas computacionais para análise e manipulação de dados químicos. Trabalho prático com software profissional (ChemAxon, ChemOffice, BioVia, etc).

9.4.5. Syllabus:

Basic elements of graph theory. Connectivity tables and linear notations. SMILES and InChi code. Molecular fingerprints. Pharmacophore. MOL, SDF, RXN and RDF formats. Structural, sub-structural and similarity search. Conformational analysis. Similarity criteria (Tanimoto, Dice and Tversky). Euclidean and Manhattan metrics. Software tools for analyzing and manipulating chemical data. Practical work with professional software (ChemAxon, ChemOffice, BioVia, etc).

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

O desenvolvimento de competências é suportado pelas aulas teóricas associadas:

- bases de dados químicas:

Teoria de grafos. Tabelas de conectividade e notações lineares.

- processamento de dados e validação de dados químicos

Análise conformacional e farmacóforo. Ferramentas computacionais para análise e manipulação de dados químicos.

- pesquisa de informações químicas relevantes:

Pesquisa por estrutura, subestrutura e similaridade.

Critérios de similaridade (Tanimoto, Dice e Tversky).

Métricas Euclidiana e Manhattan.

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

Skills developments are supported by the associated theoretical lectures as follow:

- chemical databases:

Graph theory. Connectivity tables and linear notations.

- data processing and curation of chemical data

Conformational analysis and Pharmacophore. Software tools for analyzing and manipulating chemical data.

- Find relevant chemical information:

Structural, sub-structural and similarity search.

Similarity criteria (Tanimoto, Dice and Tversky).

Euclidean and Manhattan metrics.

9.4.7. Metodologias de ensino (avaliação incluída):

Os cursos são divididos em sessões teóricas e práticas. As sessões práticas são organizadas em salas de computadores. As sessões teóricas recebem contribuições de palestrantes convidados internacionais (Prof. J. Aires de Sousa, Prof. C. Sotriffer, Prof. C. Podlipnik). A avaliação é um exame escrito de 2 horas sem consulta.

9.4.7. Teaching methodologies (including evaluation):

The courses are divided into theoretical and practical sessions. The practical sessions are organized in computer rooms. The theoretical sessions are hosting contributions from international invited lecturers (Prof. J. Aires de Sousa, Prof. C. Sotriffer, Prof. C. Podlipnik). The evaluation is a written examination during 2 hours without documents.

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

As aulas de informática são a ocasião para os alunos colocarem em prática os conceitos apresentados durante as aulas teóricas. Os palestrantes convidados contribuem com conhecimentos e técnicas mais recentes e avançados para os alunos. O exame final é o momento de avaliar as competências e conhecimentos dos alunos.

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

The computer classes are the occasions for the students to put in practices the concepts presented during the theoretical lectures. The invited lecturers are bringing the most new and edge cutting knowledge and techniques to the students. The final examination is the time to evaluate the skills and knowledge of the students.

9.4.9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória:

1. Gasteiger, J., & Engel, T. (Eds.). (2006). *Chemoinformatics: a textbook*. John Wiley & Sons.
2. Leach, A. R., & Gillet, V. J. (2007). *An introduction to chemoinformatics*
3. Varnek, A. (Ed.). (2017). *Tutorials in chemoinformatics*. John Wiley & Sons.
4. Varnek, A., & Baskin, I. I. (2011). *Chemoinformatics as a theoretical chemistry discipline*. *Molecular Informatics*, 30(1), 20-32.

Anexo II - Chemoinformatics II**9.4.1.1. Designação da unidade curricular:***Chemoinformatics II***9.4.1.1. Title of curricular unit:***Chemoinformatics II***9.4.1.2. Sigla da área científica em que se insere:***Q***9.4.1.3. Duração:***Semestral / Semester***9.4.1.4. Horas de trabalho:***51***9.4.1.5. Horas de contacto:***T:16; OT:8***9.4.1.6. ECTS:***3***9.4.1.7. Observações:***<sem resposta>***9.4.1.7. Observations:***<no answer>***9.4.2. Docente responsável e respetiva carga lectiva na unidade curricular (preencher o nome completo):***Prof. Alexandre VARNEK – T:16; OT:8***9.4.3. Outros docentes e respetivas cargas lectivas na unidade curricular:***Gilles MARCOU – OT:8***9.4.4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):***No final do curso, o aluno deverá ser capaz de:**Selecionar e calcular descritores moleculares relevantes**Construir modelos QSAR**Usar modelos QSAR para triagem virtual, para projetar novas substâncias químicas e otimizar compostos promissores.***9.4.4. Learning outcomes of the curricular unit:***By the end of the course the student should be able to:**To select and compute relevant molecular descriptors**Build QSAR models**Use QSAR models for virtual screening, to design new chemical substances and optimize lead compounds***9.4.5. Conteúdos programáticos:***Descritores moleculares 1D, 2D e 3D: fragmentos moleculares, impressões digitais, índices topológicos, propriedades físico-químicas, iso-superfícies moleculares, farmacóforos,...**Métodos de Hansch e Free-Wilson. Normalização de descritores moleculares. Seleção de descritores moleculares.**Modelos estatísticos e aprendizagem automática: regressões multi-lineares, support vector machines, CART, ANN, validação do modelo.**3D QSAR: Análise comparativa de campos moleculares (CoMFA).**Filtros (regras de Lipinski e outros).**Ligação proteína-ligando. Funções de avaliação. Bibliotecas virtuais químicas.**Sessões práticas usando o software ISIDA, DRAGON e CODESSA-PRO (QSAR / QSPR).***9.4.5. Syllabus:***Molecular Descriptors 1D, 2D et 3D: molecular fragments, fingerprints, topological indices, properties**Physicochemical, molecular iso-surfaces, pharmacophores,...*

Hansch and Free-Wilson approaches. Molecular descriptors normalization. Molecular descriptors selection. Statistical models and machine learning: multi-linear regressions, support vector machines, CART, ANN, Model validation.

3D QSAR : Comparative molecular fields analysis (CoMFA).

Filters (Lipinski rules and others).

Protein-ligand docking. Scoring functions. Chemical virtual libraries.

Practical sessions using ISIDA, DRAGON et CODESSA-PRO (QSAR/QSPR) software.

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

- Selecionar e calcular descritores moleculares relevantes

Descritores moleculares 1D, 2D e 3D

Normalização de descritores moleculares. Seleção de descritores moleculares.

- Construir modelos QSAR

Modelos estatísticos e aprendizagem automática: regressões multi-lineares, support vector machines, CART, ANN, validação do modelo.

3D QSAR: Análise comparativa de campos moleculares (CoMFA).

- Usar modelos QSAR para triagem virtual, para projetar novas substâncias químicas e otimizar compostos promissores

Filtros

Ligação proteína-ligando. Bibliotecas virtuais químicas.

Sessões práticas utilizando os softwares ISIDA, DRAGON e CODESSA-PRO (QSAR / QSPR).

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

- Select and compute relevant molecular descriptors

Molecular Descriptors 1D, 2D et 3D

Molecular descriptors normalization. Molecular descriptors selection.

- Build QSAR models

Statistical models and machine learning: multi-linear regressions, support vector machines, CART, ANN, Model validation.

3D QSAR : Comparative molecular fields analysis (CoMFA).

- Use QSAR models for virtual screening, to design new chemical substances and optimize lead compounds

Filters

Protein-ligand docking. Chemical virtual libraries.

Practical sessions using ISIDA, DRAGON et CODESSA-PRO (QSAR/QSPR) software.

9.4.7. Metodologias de ensino (avaliação incluída):

Os cursos são divididos em sessões teóricas e práticas. As sessões práticas são organizadas em salas de computadores. As sessões teóricas recebem contribuições de palestrantes convidados internacionais (Prof. J. Aires de Sousa, Prof. C. Sotriffer, Prof. C. Podlipnik). A avaliação é um exame escrito de 2 horas sem consulta.

9.4.7. Teaching methodologies (including evaluation):

The courses are divided into theoretical and practical sessions. The practical sessions are organized in computer rooms. The theoretical sessions are hosting contributions from international invited lecturers (Prof. J. Aires de Sousa, Prof. C. Sotriffer, Prof. C. Podlipnik). The evaluation is a written examination during 2 hours without documents.

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

As aulas de computadores são a ocasião para os alunos colocarem em prática os conceitos apresentados durante as aulas teóricas. Os palestrantes convidados contribuem com conhecimentos e técnicas mais recentes e avançados para os alunos. O exame final é o momento de avaliar as competências e conhecimentos dos alunos.

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

The computer classes are the occasions for the students to put in practices the concepts presented during the theoretical lectures. The invited lecturers are bringing the most new and edge cutting knowledge and techniques to the students. The final examination is the time to evaluate the skills and knowledge of the students.

9.4.9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória:

1. Gasteiger, J., & Engel, T. (Eds.). (2006). Chemoinformatics: a textbook. John Wiley & Sons.

2. Leach, A. R., & Gillet, V. J. (2007). An introduction to chemoinformatics

3. Varnek, A. (Ed.). (2017). Tutorials in chemoinformatics. John Wiley & Sons.

4. Varnek, A., & Baskin, I. I. (2011). Chemoinformatics as a theoretical chemistry discipline. Molecular Informatics, 30(1), 20-32.

Anexo II - Chemoinformatics III

9.4.1.1. Designação da unidade curricular:

Chemoinformatics III

9.4.1.1. Title of curricular unit:*Chemoinformatics III***9.4.1.2. Sigla da área científica em que se insere:***Q***9.4.1.3. Duração:***Semestral / Semester***9.4.1.4. Horas de trabalho:***51***9.4.1.5. Horas de contacto:***T:16; OT:8***9.4.1.6. ECTS:***3***9.4.1.7. Observações:***<sem resposta>***9.4.1.7. Observations:***<no answer>***9.4.2. Docente responsável e respetiva carga lectiva na unidade curricular (preencher o nome completo):***Prof. Alexandre VARNEK – T:16; OT:8***9.4.3. Outros docentes e respetivas cargas lectivas na unidade curricular:***Gilles MARCOU – OT:8***9.4.4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):***No final do curso, o aluno deverá ser capaz de:**Criar e gerir uma base de dados química**Pesquisar e obter informações numa base de dados química**Analisar quantitativamente o conteúdo de uma base de dados**Avaliar a novidade de novos compostos em comparação com um conjunto de dados existente***9.4.4. Learning outcomes of the curricular unit:***By the end of the course the student should be able to:**Create and manage a chemical database**Search and retrieve information in a chemical database**Quantitatively analyze the content of a database**Assess the novelty of new compounds compared to an existing dataset***9.4.5. Conteúdos programáticos:***Modelo relacional. Linguagem SQL. Arquitetura (Oracle / ISIS / Accord). Relações, atributos, moléculas.**Bases de dados bibliográficas (Chemical Abstracts, Science Citation Index, Pascal), físico-químicas (Gmelin, Beilstein), espectroscópicas (SPECINFO), cristalográficas (Cambridge e Karlsruhe) e outras.**Criação de bases de dados químicos utilizando os softwares ChemAxon, ChemFinder e ISISBase.**Métodos para análise de agrupamentos de objetos químicos: agrupamentos hierárquicos e não hierárquicos.**Preparação de vários conjuntos de dados.**Geração de bibliotecas combinatoriais: abordagens "baseadas em monómeros" e "baseadas em produtos".**Bibliotecas "direcionadas" e "diversificadas". Software ISIDA / CombiLib.***9.4.5. Syllabus:***Relational model. SQL language. Architecture (Oracle / ISIS / Accord). Relations, attributes, molecules.**Bibliographic databases (Chemical Abstracts, Science Citation Index, Pascal), physicochemical (Gmelin, Beilstein), spectroscopic (SPECINFO), crystallographic (Cambridge and Karlsruhe) and others.**Creation of chemical databases using ChemAxon, ChemFinder and ISISBase software.**Methods for cluster analysis of chemical objects: hierarchical and non-hierarchical clustering.**Preparation of various datasets.**Generation of combinatorial libraries: "monomer-based" and "product-based" approaches.**"Targeted" and "diversified" libraries. ISIDA / CombiLib software.*

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

- Criar e gerir uma base de dados química

Modelo relacional. Linguagem SQL. Arquitetura (Oracle / ISIS / Accord). Relações, atributos, moléculas.

Criação de bases de dados químicos utilizando os softwares ChemAxon, ChemFinder e ISISBase.

- Pesquisar e obter informações numa base de dados química

Bases de dados bibliográficas (Chemical Abstracts, Science Citation Index, Pascal), físico-químicas (Gmelin, Beilstein), espectroscópicas (SPECINFO), cristalográficas (Cambridge e Karlsruhe) e outras.

- Analisar quantitativamente o conteúdo de uma base de dados

Métodos para análise de agrupamentos de objetos químicos: agrupamentos hierárquicos e não hierárquicos.

Preparação de vários conjuntos de dados.

- Avaliar a novidade de novos compostos em comparação com um conjunto de dados existente

Geração de bibliotecas combinatorias: abordagens "baseadas em monómeros" e "baseadas em produtos".

Bibliotecas "direcionadas" e "diversificadas". Software ISIDA / CombiLib.

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

- Create and manage a chemical database

Relational model. SQL language. Architecture (Oracle / ISIS / Accord). Relations, attributes, molecules.

Creation of chemical databases using ChemAxon, ChemFinder and ISISBase software.

- Search and retrieve information in a chemical database

Bibliographic databases (Chemical Abstracts, Science Citation Index, Pascal), physicochemical (Gmelin, Beilstein), spectroscopic (SPECINFO), crystallographic (Cambridge and Karlsruhe) and others.

- Quantitatively analyze the content of a database

Methods for cluster analysis of chemical objects: hierarchical and non-hierarchical clustering.

Preparation of various datasets.

- Assess the novelty of new compounds compared to an existing dataset

Generation of combinatorial libraries: "monomer-based" and "product-based" approaches.

"Targeted" and "diversified" libraries. ISIDA / CombiLib software.

9.4.7. Metodologias de ensino (avaliação incluída):

Os cursos são divididos em sessões teóricas e práticas. As sessões práticas são organizadas em salas de computadores. As sessões teóricas recebem contribuições de palestrantes convidados internacionais (Prof. J. Aires de Sousa, Prof. C. Sotriffer, Prof. C. Podlipnik). A avaliação é um exame escrito durante 2 horas sem consulta.

9.4.7. Teaching methodologies (including evaluation):

The courses are divided into theoretical and practical sessions. The practical sessions are organized in computer rooms. The theoretical sessions are hosting contributions from international invited lecturers (Prof. J. Aires de Sousa, Prof. C. Sotriffer, Prof. C. Podlipnik). The evaluation is a written examination during 2 hours without documents.

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

As aulas de informática são a ocasião para os alunos colocarem em prática os conceitos apresentados durante as aulas teóricas. Os palestrantes convidados contribuem com conhecimentos e técnicas mais recentes e avançados para os alunos. O exame final é o momento de avaliar as competências e conhecimentos dos alunos.

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

The computer classes are the occasions for the students to put in practices the concepts presented during the theoretical lectures. The invited lecturers are bringing the most new and edge cutting knowledge and techniques to the students. The final examination is the time to evaluate the skills and knowledge of the students.

9.4.9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória:

1. Gasteiger, J., & Engel, T. (Eds.). (2006). *Chemoinformatics: a textbook*. John Wiley & Sons.

2. Leach, A. R., & Gillet, V. J. (2007). *An introduction to chemoinformatics*

3. Varnek, A. (Ed.). (2017). *Tutorials in chemoinformatics*. John Wiley & Sons.

4. Varnek, A., & Baskin, I. I. (2011). *Chemoinformatics as a theoretical chemistry discipline*. *Molecular Informatics*, 30(1), 20-32.

Anexo II - Data Mining Methods**9.4.1.1. Designação da unidade curricular:**

Data Mining Methods

9.4.1.1. Title of curricular unit:

Data Mining Methods

9.4.1.2. Sigla da área científica em que se insere:

Q

9.4.1.3. Duração:*Semestral / Semester***9.4.1.4. Horas de trabalho:**

51

9.4.1.5. Horas de contacto:*TP:24***9.4.1.6. ECTS:**

3

9.4.1.7. Observações:*<sem resposta>***9.4.1.7. Observations:***<no answer>***9.4.2. Docente responsável e respetiva carga lectiva na unidade curricular (preencher o nome completo):***LACHICHE Nicolas - TP:12***9.4.3. Outros docentes e respetivas cargas lectivas na unidade curricular:***MARCOU Gilles - TP:12***9.4.4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):***No final do curso, o aluno deverá ser capaz de:**Construir e validar um modelo usando algoritmos de aprendizagem automática e inteligência artificial para agrupar, classificar ou extrair regras de associação dos dados**Escolher e usar métodos relevantes para uma determinada tarefa**Compreender e gerir riscos e dificuldades associadas aos métodos de aprendizagem automática**Entender criticamente os desafios e limites da aprendizagem automática**Aplicar esses métodos com o software WEKA e KNIME***9.4.4. Learning outcomes of the curricular unit:***By the end of the course the student should be able to:**Build and validate a model using machine learning and artificial intelligence algorithms to cluster, classify or extract association rules from data**Chose and use relevant methods for a given task**Understand and manage pitfalls in the use of machine learning methods**Critically understand challenges and limits of machine learning**Apply of those methods with WEKA and KNIME software***9.4.5. Conteúdos programáticos:***Conteúdos:**Conceitos básicos de aprendizagem automática**Aprendizagem automática e extração de conhecimento a partir de bases de dados.**Visão geral de algoritmos para aprendizagem automática com regras de agrupamento, classificação e associação e foco na representação de dados**Prática com os softwares WEKA e KNIME**Conhecimentos:**Pré-processamento de dados; avaliação; integração; representações.**Padrões frequentes e regras de associação.**Agrupamento: k-means; maximização de expectativas.**Classificação: k vizinhos mais próximos; classificador bayesiano.**Árvores de decisão: princípio, classificação, regressão, sensibilidade, random forest.**Redes neuronais: camadas simples e múltiplas; retropropagação; pontos fortes e limites; exemplo (agrupamento de reações com mapas de Kohonen).**Support-vector machines: princípio, classificação e regressão.**Algoritmos genéticos: conceitos; função de avaliação; cruzamento e mutações.***9.4.5. Syllabus:***Content:**Machine learning basic concepts**Machine learning and knowledge discovery from databases.**Overview of algorithms for clustering, classification, and association rule learning and focus on data representation*

Practice with WEKA and KNIME softwares

Knowledge:

Data pre-processing ; evaluation ; integration ; representations.

Frequent patterns and association rules.

Clustering : k means ; expectation maximization.

Classification : k nearest neighbours ; naive Bayesian classifier.

Decision trees : principle, classification, regression, sensitivity, random forest.

Neural networks : single and multiple layers ; backpropagation ; strengths and limits ; example (clustering of reactions by Kohonen maps).

Support Vector Machines : principle, classification and regression.

Genetic algorithms : concepts ; fitness function ; crossover and mutations.

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

O desenvolvimento de competências é suportado por aulas teóricas:

•Entender criticamente os desafios e limites da aprendizagem automática

Conceitos básicos de aprendizagem automática. Aplicação à descoberta de conhecimento a partir de bases de dados.

Visão geral de algoritmos para aprendizagem de regras de agrupamento, classificação e associação; enfoque na representação de dados.

•Construção e validação dum modelo usando algoritmos de aprendizagem automática e inteligência artificial

Laboratórios com WEKA e KNIME.

Exemplos detalhados

•Escolha e utilização de métodos relevantes para uma determinada tarefa

Regras de associação.

Clustering.

Classificação.

Árvores de decisão

Redes neurais

Support-vector machines

Algoritmos genéticos.

•Compreender e gerir riscos no uso de métodos de aprendizagem automática

Pré-processamento de dados; avaliação; integração; representações.

Conceitos básicos de aprendizagem automática

Aprendizagem automática e extração de conhecimento a partir de bancos de dados.

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

Skills developments are supported by the associated theoretical lectures as follow:

- Critically understand challenges and limits of machine learning

Machine learning basic concepts

Machine learning and knowledge discovery from databases.

Overview of algorithms for clustering, classification, and association rule learning and focus on data representation

- Build and validate a model using machine learning and artificial intelligence algorithms

Labs with WEKA and KNIME.

Detailed examples

- Chose and use relevant methods for a given task

Association rules.

Clustering.

Classification.

Decision trees.

Neural networks.

Support Vector Machines.

Genetic algorithms.

- Understand and manage pitfalls in the use of machine learning methods

Data pre-processing ; evaluation ; integration ; representations.

Machine learning basic concepts

Machine learning and knowledge discovery from databases.

9.4.7. Metodologias de ensino (avaliação incluída):

O ensino inclui palestras integradas. Metade delas são orientadas para tópicos teóricos, a outra metade em sessões práticas. As palestras são organizadas em salas de computadores e ilustradas usando os pacotes de software WEKA e KNIME. A avaliação consiste num exame final escrito de 2 horas com consulta. Metade da avaliação incide em conceitos teóricos e a outra metade na prática.

9.4.7. Teaching methodologies (including evaluation):

The teaching is proposed as integrated lectures. Half of them are oriented to theoretical topics, the other half on practical sessions. The lectures are organized in computer rooms and illustrated using the WEKA and KNIME software packages. The evaluation is a written examination during 2 hours with documents. Half of the evaluation is oriented toward theory and the second half is oriented toward practice.

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

As aulas de computadores são a ocasião para os alunos colocarem em prática os conceitos apresentados durante as aulas teóricas. O exame final é o momento de avaliar as competências e conhecimentos dos alunos.

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

The computer classes are the occasions for the students to put in practices the concepts presented during the theoretical lectures. The final examination is the time to evaluate the skills and knowledge of the students.

9.4.9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória:

1. Witten, I. H., Frank, E., Hall, M. A., & Pal, C. J. (2016). *Data Mining: Practical machine learning tools and techniques*. Morgan Kaufmann.
2. Berthold, M. R., Cebron, N., Dill, F., Gabriel, T. R., Kötter, T., Meinl, T., ... & Wiswedel, B. (2009). *KNIME-the Konstanz information miner: version 2.0 and beyond*. *AcM SIGKDD explorations Newsletter*, 11(1), 26-31.

Anexo II - Molecular Dynamics Simulations**9.4.1.1. Designação da unidade curricular:**

Molecular Dynamics Simulations

9.4.1.1. Title of curricular unit:

Molecular Dynamics Simulations

9.4.1.2. Sigla da área científica em que se insere:

Q

9.4.1.3. Duração:

Semestral / Semester

9.4.1.4. Horas de trabalho:

64

9.4.1.5. Horas de contacto:

TP:24

9.4.1.6. ECTS:

3

9.4.1.7. Observações:

<sem resposta>

9.4.1.7. Observations:

<no answer>

9.4.2. Docente responsável e respetiva carga lectiva na unidade curricular (preencher o nome completo):

Prof. Rachelle SCHURHAMMER – TP:24

9.4.3. Outros docentes e respetivas cargas lectivas na unidade curricular:

<sem resposta>

9.4.4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):

O curso foi desenvolvido para dar aos alunos de química ou afins uma introdução à teoria da modelação e o uso da modelação como uma ferramenta na investigação química. Uma ênfase considerável é dada ao uso prático da modelação e à compreensão dos métodos, o que se estende para além das competências puramente operacionais. O objetivo é fornecer aos alunos a base suficiente para avaliar independentemente a escolha dos métodos e a fiabilidade dos resultados em modelação molecular.

9.4.4. Learning outcomes of the curricular unit:

The course is designed to give student in chemistry and related subjects an introduction to the theory for modeling, and use of modeling as a tool in chemical research. Considerable emphasis will be placed on practical use of modeling and an understanding of the methods which extends beyond purely operational skills. The aim is to give the students the sufficient background to independently evaluate choice of methods and reliability of results in molecular modeling.

9.4.5. Conteúdos programáticos:

Métodos computacionais baseados em mecânica molecular, mecânica estatística e informática são introduzidos com foco nos sistemas moleculares. As metodologias incluem campos de força, dinâmica molecular e simulações de

Monte Carlo, minimizações de energia e análise conformacional, sistemas periódicos de modelos de solvatação.

9.4.5. Syllabus:

Computational methods based on molecular mechanics, statistical mechanics and informatics are introduced with the focus on molecular systems. The methodologies include force fields, molecular dynamics and Monte Carlo simulations, energy minimizations and conformational analysis, solvation models periodic systems.

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

As aulas teóricas são organizadas de modo a:

- *Contextualizar e definir a disciplina de Modelação Molecular.*
- *Definir os fundamentos e cálculos teóricos em mecânica molecular.*
- *Compreender e aplicar os métodos de otimização de modelos moleculares: minimização e dinâmica molecular.*
- *Compreender e usar simulações de Monte Carlo e Dinâmica Molecular de sistemas moleculares.*
- *Apreciar a grande variedade de métodos de simulação molecular que foram desenvolvidos e escolher um método apropriado para o mecanismo desejado.*
- *Relacionar propriedades microscópicas, como velocidades atômicas, com propriedades macroscópicas materiais, como temperatura, difusividade, etc.*
- *Avaliar criticamente artigos da literatura científica que utilizam simulações moleculares.*

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

The lectures are organize, in order to:

- *Contextualize and define the discipline of Molecular Modeling.*
- *Define the foundations and theoretical calculations in molecular mechanics.*
- *Understand and apply the methods of optimization of molecular models: minimization and molecular dynamics.*
- *Understand and use Monte Carlo and Molecular Dynamics simulations of molecular systems.*
- *Appreciate the wide variety of molecular simulation methods that have been developed, and choose an appropriate method for a desired mechanism.*
- *Relate microscopic properties such as atomic velocities to macroscopic material properties such as temperature, diffusivity etc.*
- *Assess articles from the scientific literature that utilize molecular simulations critically.*

9.4.7. Metodologias de ensino (avaliação incluída):

Os cursos são divididos em sessões teóricas e práticas. As sessões práticas são organizadas em salas de computadores. A avaliação consiste num exame escrito de 2 horas sem consulta.

9.4.7. Teaching methodologies (including evaluation):

The courses are divided into theoretical and practical sessions. The practical sessions are organized in computer rooms. The evaluation is a written examination during 2 hours without documents.

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

As aulas de informática são a ocasião para os alunos colocarem em prática os conceitos apresentados durante as aulas teóricas. O exame final é o momento de avaliar as competências e conhecimentos dos alunos.

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

The computer classes are the occasions for the students to put in practices the concepts presented during the theoretical lectures. The final examination is the time to evaluate the skills and knowledge of the students.

9.4.9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória:

1. *A. R. Leach: Molecular modelling: Principles and applications, 2nd ed, Prentice Hall, Harlow, 2001.*
2. *F. Jensen: Introduction to computational chemistry, ed. Wiley, England, 1999*
3. *C.J.Cramer: Essentials of computational chemistry: theory and models, ed. Wiley, England, 2005*

Anexo II - Quantum Chemistry

9.4.1.1. Designação da unidade curricular:

Quantum Chemistry

9.4.1.1. Title of curricular unit:

Quantum Chemistry

9.4.1.2. Sigla da área científica em que se insere:

Q

9.4.1.3. Duração:

Semestral / Semester

9.4.1.4. Horas de trabalho:

64

9.4.1.5. Horas de contacto:

T:16; OT:8

9.4.1.6. ECTS:

3

9.4.1.7. Observações:

<sem resposta>

9.4.1.7. Observations:

<no answer>

9.4.2. Docente responsável e respetiva carga lectiva na unidade curricular (preencher o nome completo):

Prof. Emmanuel FROMAGER – T:16; OT:8

9.4.3. Outros docentes e respetivas cargas lectivas na unidade curricular:

<sem resposta>

9.4.4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):

Os alunos receberão uma visão geral dos métodos químicos quânticos convencionais (com base no cálculo explícito da função de onda eletrónica ou na densidade eletrónica). Cada método será introduzido com motivações físicas e ilustrado por trabalhos práticos, enfatizando o seu domínio de aplicabilidade. Assim, os alunos devem tornar-se utilizadores “inteligentes” de programas computacionais de química quântica, e também desenvolver competências para acompanhar os últimos desenvolvimentos no campo.

9.4.4. Learning outcomes of the curricular unit:

The students will be given an overview of conventional quantum chemical methods (based either on the explicit calculation of the electronic wavefunction or on the electron density). Each method will be introduced with physical motivations and illustrated by practical work while emphasizing on its domain of applicability. Thus, the students should become “smart” users of quantum chemical packages but they should also be able to follow the latest developments in the field.

9.4.5. Conteúdos programáticos:

O curso começa com uma introdução geral à química quântica, onde é destacada a relação entre a teoria da estrutura eletrónica e o cálculo das propriedades moleculares. O resto do curso concentra-se no cálculo das energias eletrónicas do estado fundamental [extensões para estados excitados são brevemente discutidas]. Após uma introdução ao segundo formalismo de quantização, são apresentados os métodos Hartree-Fock (HF) e pós-HF. O conceito de correlação estática (ou forte) de elétrões é introduzido dentro de um modelo simples (base mínima) para a molécula de hidrogénio estirada. Em conexão com correlação forte, a abordagem multiconfiguracional de campo auto-consistente (MCSCF) e os tratamentos pós-MCSCF também são discutidos. Uma palestra introdutória à teoria do funcional da densidade (DFT) é finalmente dada. Em ligação com essas palestras, são estudadas computacionalmente estruturas químicas para ilustrar os diferentes métodos.

9.4.5. Syllabus:

The course starts with a general introduction to quantum chemistry where the connection between electronic structure theory and the calculation of molecular properties is highlighted. The rest of the course focuses on the calculation of electronic ground-state energies [extensions to excited states are briefly discussed]. Following an introduction to the second quantization formalism, Hartree-Fock (HF) and post-HF methods are presented. The concept of static (or strong) electron correlation is introduced within a simple (minimal basis) model for the stretched hydrogen molecule. In connection with strong correlation, the multiconfigurational self-consistent field (MCSCF) approach as well as post-MCSCF treatments are also discussed. An introductory lecture to density-functional theory (DFT) is finally given. In connection with these lectures, chemical structures will be studied computationally in order to illustrate the different methods.

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

As seguintes competências serão desenvolvidas:

** Compreensão da teoria subjacente a um determinado método químico quântico.*

Introdução à química quântica, conexão entre teoria da estrutura eletrónica e cálculo de propriedades moleculares

** Compreensão das principais etapas na implementação computacional de um método.*

Cálculo de energias eletrónicas do estado fundamental, extensões a estados excitados. Segundo formalismo de quantização, métodos Hartree-Fock(HF) e pós-HF. Conceito de correlação estática(ou forte) de elétrões. Introdução à teoria do funcional da densidade.

* *Capacidade de ler artigos científicos sobre métodos químicos quânticos.*

Estudos de caso de estruturas químicas por métodos computacionais.

* *Dependendo do sistema químico e da propriedade estudada, capacidade de escolher o método adequado, submeter cálculos e analisar os resultados.*

Hartree-Fock(HF), métodos pós-HF, campo multiconfiguracional autoconsistente (MCSCF) e pós-MCSCF. Teoria do funcional da densidade (DFT).

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

The following skills will be developed:

* *Understanding the theory underlying a given quantum chemical method.*

General introduction to quantum chemistry, connection between electronic structure theory and the calculation of molecular properties

* *Understanding the key steps in the computational implementation of a method.*

Calculation of electronic ground-state energies, extensions to excited states. Second quantization formalism, Hartree-Fock (HF) and post-HF methods. Concept of static (or strong) electron correlation. Introduction to density-functional theory.

* *Ability to read scientific articles on quantum chemical methods.*

Case studies of chemical structures by computational methods.

* *Depending of the chemical system and the studied property, ability to choose the adequate method, submit calculations and analyze the numerical results.*

Hartree-Fock (HF), post-HF methods, multiconfigurational self-consistent field (MCSCF) and post-MCSCF. Density-functional theory (DFT).

9.4.7. Metodologias de ensino (avaliação incluída):

Os cursos são divididos em sessões teóricas e práticas. As sessões práticas são organizadas em salas de computadores. A avaliação consiste num exame escrito durante 2 horas sem consulta.

9.4.7. Teaching methodologies (including evaluation):

The courses are divided into theoretical and practical sessions. The practical sessions are organized in computer rooms. The evaluation is a written examination during 2 hours without documents.

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

As aulas de computadores são as ocasiões para os alunos colocarem em prática os conceitos apresentados durante as aulas teóricas. O exame final é o momento de avaliar as competências e conhecimentos dos alunos.

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

The computer classes are the occasions for the students to put in practices the concepts presented during the theoretical lectures. The final examination is the time to evaluate the skills and knowledge of the students.

9.4.9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória:

1. *Leach, A. R., & Leach, A. R. (2001). Molecular modelling: principles and applications. Pearson education.*
2. *Levine, I. Quantum chemistry (2000). Pearson Education.*

Anexo II - Structured Based Drug Design

9.4.1.1. Designação da unidade curricular:

Structured Based Drug Design

9.4.1.1. Title of curricular unit:

Structured Based Drug Design

9.4.1.2. Sigla da área científica em que se insere:

Q

9.4.1.3. Duração:

Semestral / Semester

9.4.1.4. Horas de trabalho:

51

9.4.1.5. Horas de contacto:

T:16; OT:8

9.4.1.6. ECTS:

9.4.1.7. Observações:*<sem resposta>***9.4.1.7. Observations:***<no answer>***9.4.2. Docente responsável e respetiva carga lectiva na unidade curricular (preencher o nome completo):***KELLENBERGER Esther - T:16; OT:8***9.4.3. Outros docentes e respetivas cargas lectivas na unidade curricular:***<sem resposta>***9.4.4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):***O aluno deve ser capaz de: • Realizar tarefas simples em biologia estrutural usando ferramentas computacionais especializadas.*

- Visualizar e interpretar a estrutura tridimensional de uma proteína.*
- Usar a noção de semelhança entre os locais de ligação de proteínas para inferir propriedades relativas a uma nova proteína (estrutura por homologia, quimiogenómica).*
- Identificar e classificar em termos de importância as interações terapêuticas alvo / molécula bioativa.*
- Construir e usar um farmacóforo.*
- Executar e avaliar um re-docking, um cross-docking.*
- Realizar a triagem virtual de uma biblioteca de produtos químicos por docking ou pela abordagem do farmacóforo.*
- Explorar informações estruturais para propor modificações químicas num ligando.*
- Desenvolver e gerir um projeto de descoberta de moléculas bioativas em equipa.*

9.4.4. Learning outcomes of the curricular unit:*The student must be able to:*

- Perform simple tasks in structural biology using specialized computer tools*
- Visualize and interpret the three-dimensional structure of a protein*
- To use the notion of similarity between binding pockets of proteins to infer properties concerning a new protein (structure by homology, chemogenomics)*
- Identify and classify by importance the therapeutic target / bioactive molecule interactions.*
- Build and use a pharmacophore*
- Execute and evaluate a re-docking, a cross-docking*
- Realize the virtual screening of a chemical library by docking or by the pharmacophore approach.*
- Exploit structural information to propose chemical modifications on a ligand*
- Develop and manage a bioactive molecule discovery project in a team.*

9.4.5. Conteúdos programáticos:*Aulas teóricas:*

- (1) Noções básicas de reconhecimento molecular: aspectos termodinâmicos e estruturais,*
- (2) a estrutura 3D de proteínas: definição e descrição, modelação por homologia, análise geométrica e energética*
- (3) previsão da interação proteína-ligando por métodos de farmacóforo, docking e funções de avaliação.*

Aulas práticas serão realizadas na sala de informática. Conteúdos:

- (1) a análise da estrutura 3D de proteínas da Protein Data Bank,*
- (2) a preparação de uma estrutura proteica 3D para o design de fármacos,*
- (3) principais métodos de design de fármacos para identificação de moléculas bioativas (farmacóforo, docking, triagem virtual).*

9.4.5. Syllabus:*The lecture focuses on the following topics:*

- (1) The basics of molecular recognition: thermodynamic and structural aspects,*
- (2) the 3D structure of proteins: definition and description, homology modeling, geometric and energetic analysis*
- (3) prediction of the protein-ligand interaction by pharmacophore, docking, and scoring methods.*

Practical lessons will be made in the computer room. They relate to:

- (1) the analysis of Protein Data Bank protein 3D structure,*
- (2) the preparation of a 3D protein structure for drug design,*
- (3) and the main methods of drug design for identification of bioactive molecules (pharmacophore, docking, virtual screening)*

9.4.6. Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular*O desenvolvimento de competências é suportado por aulas teóricas:*

- Tarefas básicas em biologia estrutural, visualizar e interpretar a estrutura 3D de uma proteína*

Aulas práticas na sala de informática:

- *Inferir propriedades relativas a uma nova proteína (estrutura por homologia, quimiogenómica); identificar e classificar por importância as interações terapêuticas alvo/molécula bioativa.*
 - *Noções básicas de reconhecimento molecular: aspetos termodinâmicos e estruturais.*
 - *Construir e usar um farmacóforo; executar e avaliar um re-docking, um cross-docking.*
 - *Prever a interação proteína-ligando por métodos de farmacóforo, docking e funções de avaliação.*
 - *Realizar a triagem virtual de uma biblioteca química, propor modificações químicas num ligando.*
 - *Principais métodos de desenho de fármacos para identificação de moléculas bioativas.*
 - *Desenvolver e gerir um projeto de descoberta de moléculas bioativas em equipa.*
- Projeto de descoberta de fármacos durante sessões de laboratório de informática.*

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

Skills developments are supported by the associated theoretical lectures as follow:

- Basic tasks in structural biology, visualize and interpret the three-dimensional structure of a protein

Practical lessons will be made in the computer room

- Infer properties concerning a new protein (structure by homology, chemogenomics); identify and classify by importance the therapeutic target / bioactive molecule interactions.

The basics of molecular recognition: thermodynamic and structural aspects

- Build and use a pharmacophore; execute and evaluate a re-docking, a cross-docking

Prediction of the protein-ligand interaction by pharmacophore, docking, and scoring methods.

- Realize the virtual screening of a chemical library, propose chemical modifications on a ligand

Main methods of drug design for identification of bioactive molecules

- Develop and manage a bioactive molecule discovery project in a team.

Drug discovery project during computer lab sessions

9.4.7. Metodologias de ensino (avaliação incluída):

O ensino inclui palestras integradas. Metade delas são orientadas para tópicos teóricos, a outra metade em sessões práticas. As palestras são organizadas em salas de computadores e ilustradas usando o pacote de software MOE. A avaliação incide no livro de laboratório do aluno, em projetos de descoberta de fármacos nos quais os alunos trabalham em equipa e num exame final escrito de 2 horas sem consulta.

9.4.7. Teaching methodologies (including evaluation):

The teaching is proposed as integrated lectures. Half of them are oriented to theoretical topics, the other half on practical sessions. The lectures are organized in computer rooms and illustrated using the MOE software package. The evaluation is based on a monitoring of the lab book of the student, a drug discovery projects in which the students are solving the problem as a team and a final written examination during 2 hours without documentation.

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

O aluno deve construir uma compreensão mais profunda do reconhecimento molecular. Aprende a explorar informações estruturais para prever o efeito de uma molécula com características de fármaco numa proteína alvo terapêutica. Manipula conceitos e ferramentas utilizadas na indústria farmacêutica para a identificação e otimização de novos compostos bioativos.

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

The student shall build a deeper understanding of molecular recognition. He learns to exploit structural information to predict the effect of a drug-like molecule on a therapeutic target protein. He manipulates concepts and tools used in the pharmaceutical industry for the identification and optimization of new bioactive compounds.

9.4.9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória:

1. *Wermuth, C. G. (Ed.). (2011). The practice of medicinal chemistry. Academic Press.*
2. *Davis, A., & Ward, S. E. (Eds.). (2014). The handbook of medicinal chemistry: principles and practice. Royal Society of Chemistry.*

Anexo II - Internet Technology

9.4.1.1. Designação da unidade curricular:

Internet Technology

9.4.1.1. Title of curricular unit:

Internet Technology

9.4.1.2. Sigla da área científica em que se insere:

Q

9.4.1.3. Duração:

Semestral / Semester

9.4.1.4. Horas de trabalho:

51

9.4.1.5. Horas de contacto:

TP:30

9.4.1.6. ECTS:

3

9.4.1.7. Observações:

<sem resposta>

9.4.1.7. Observations:

<no answer>

9.4.2. Docente responsável e respetiva carga lectiva na unidade curricular (preencher o nome completo):

Prof. Eric CHRISTOFFEL – TP:30

9.4.3. Outros docentes e respetivas cargas lectivas na unidade curricular:

<sem resposta>

9.4.4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):*No final deste curso os alunos deverão ser capazes de*

- Desenvolver documentos em HTML e CSS, separando elementos estruturais de formatação CSS;
- Organizar a página HTML usando a semântica HTML5 e controlando o design com CSS3;
- Criar um formulário web;
- Desenvolver uma aplicação web e publicá-la num servidor web remoto.

9.4.4. Learning outcomes of the curricular unit:*Skills to acquire:*

- Develop in HTML and CSS, separating structural elements from CSS formatting,
- Organize the HTML page using the new HTML5 semantics, and controlling the design with CSS3,
- Create a web form,
- Develop a web application and publish it to a remote web server.

9.4.5. Conteúdos programáticos:*Desenvolvimento front-end em HTML5 e CSS3 e desenvolvimento back-end em PHP e MySQL, a fim de desenvolver uma aplicação web em relação com uma base de dados.**Linguagem HTML 5, elementos estruturais do conteúdo e novos elementos semânticos, para garantir o desenvolvimento front-end.**Propriedades de estilo CSS (Cascading Style Sheet), para definir a aparência dos elementos de um documento HTML, visualizado por um navegador, mas também para controlar o design de uma página da web.**Desenvolvimento de backend com a linguagem PHP, usando bases de dados MySQL para armazenar e manipular dados, para produzir uma aplicação web alimentada por uma fonte de dados.***9.4.5. Syllabus:***Front-end development in HTML5 and CSS3 and back-end development in PHP and MySQL, in order to develop a web application in relation with a database.*

- Learning HTML 5, structural elements of content and new semantic elements, to ensure front-end development.
- Learning CSS style properties (Cascading Style Sheet), in order to define the appearance of the elements of an HTML document, rendered by a browser, but also to control the design of a web page.
- Back-end development by learning the PHP language, using MySQL databases to store and manipulate data, to produce a web application in relation to a data source.

9.4.6. Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular*O objetivo deste curso é levar os alunos a entender a utilidade e o alcance universal dos conceitos e metodologias das tecnologia de Internet em química.**As competências a serem desenvolvidas e adquiridas durante o treino são as seguintes:**Programar em HTML e CSS, separando elementos estruturais da formatação CSS**- Palestras em HTML5 e CSS3**Organizar a página HTML usando a nova semântica HTML5 e controlando o design com CSS3**- Elementos estruturais do conteúdo e novos elementos semânticos, desenvolvimento front-end**Criar um formulário web**- Desenvolvimento de back-end*

*Desenvolver uma aplicação web e publicá-la num servidor web remoto.
- Palestras sobre linguagens PHP e MySQL, comunicação com bases de dados.*

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

The purpose of this course is to lead students to an understanding of the utility and universal scope of the concepts and methodology of Internet technology in chemistry.

The skills to be developed and acquired during the training are as follows:

Develop in HTML and CSS, separating structural elements from CSS formatting

-Lectures on HTML5 and CSS3

Organize the HTML page using the new HTML5 semantics, and controlling the design with CSS3

-Structural elements of content and new semantic elements, front-end development

Create a web form

-Back-end development

Develop a web application and publish it to a remote web server.

-Lectures on PHP and MySQL languages, communications with databases.

9.4.7. Metodologias de ensino (avaliação incluída):

O curso integra aulas teóricas e sessões práticas. Apresentação e avaliação de projetos individuais.

9.4.7. Teaching methodologies (including evaluation):

The courses are divided into theoretical and practical sessions. Presentation and evaluation of individual projects.

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

As palestras fornecerão aos alunos a base teórica. As sessões de laboratório permitem que os alunos aprendam enquanto desenvolvem documentos e aplicações web.

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

Lectures will provide the students with the theoretical background and lab sessions enable the students to learn by practicing with the development of web documents and applications.

9.4.9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória:

Joseph B. Miller, Internet Technologies and Information Services, 2nd Edition

9.5. Fichas curriculares de docente

Anexo III - HIBERT Marcel

9.5.1. Nome do docente (preencher o nome completo):

HIBERT Marcel

9.5.2. Ficha curricular de docente:

[Mostrar dados da Ficha Curricular](#)

Anexo III - MARCOU Gilles

9.5.1. Nome do docente (preencher o nome completo):

MARCOU Gilles

9.5.2. Ficha curricular de docente:

[Mostrar dados da Ficha Curricular](#)

Anexo III - KELLENBERGER Esther

9.5.1. Nome do docente (preencher o nome completo):

KELLENBERGER Esther

9.5.2. Ficha curricular de docente:

[Mostrar dados da Ficha Curricular](#)

Anexo III - STOTE Roland

9.5.1. Nome do docente (preencher o nome completo):

STOTE Roland

9.5.2. Ficha curricular de docente:[Mostrar dados da Ficha Curricular](#)**Anexo III - CHRISTOFFEL Eric****9.5.1. Nome do docente (preencher o nome completo):***CHRISTOFFEL Eric***9.5.2. Ficha curricular de docente:**[Mostrar dados da Ficha Curricular](#)**Anexo III - SCHURHAMMER Rachel****9.5.1. Nome do docente (preencher o nome completo):***SCHURHAMMER Rachel***9.5.2. Ficha curricular de docente:**[Mostrar dados da Ficha Curricular](#)**Anexo III - FROMAGER Emmanuel****9.5.1. Nome do docente (preencher o nome completo):***FROMAGER Emmanuel***9.5.2. Ficha curricular de docente:**[Mostrar dados da Ficha Curricular](#)**Anexo III - LACHICHE Nicolas****9.5.1. Nome do docente (preencher o nome completo):***LACHICHE Nicolas***9.5.2. Ficha curricular de docente:**[Mostrar dados da Ficha Curricular](#)**Anexo III - VARNEK Alexandre****9.5.1. Nome do docente (preencher o nome completo):***VARNEK Alexandre***9.5.2. Ficha curricular de docente:**[Mostrar dados da Ficha Curricular](#)**Anexo III - CECCHINI Marco****9.5.1. Nome do docente (preencher o nome completo):***CECCHINI Marco***9.5.2. Ficha curricular de docente:**[Mostrar dados da Ficha Curricular](#)