



XI Escola de Modelagem
Molecular de Sistemas Biológicos

PROGRAMAÇÃO DE PALESTRAS

 www.emmsb.lncc.br  [@emmsb.lncc](https://www.instagram.com/emmsb.lncc)

19/08/2024 (2ª FEIRA)

08:00: Credenciamento

08:45: Abertura do evento

09:00: Sobre rádios quebrados, a biblioteca de Borges e a associação de proteínas.

Palestrante: Roberto Lins

09:50: Campos de força clássicos e dinâmica molecular.

Palestrante: Leandro Martínez

10:30: Coffee Break

11:00: Técnicas de aprendizado de máquina e deep learning.

Palestrante: Matheus M. P. da Silva

11:40: Apresentações Orais (Alunos)

12:00: Inteligência artificial em predição de estruturas de proteínas.

Palestrante: Fábio L. Custódio

12:40: Almoço

14:00: Minicursos

20/08/2024 (3ª FEIRA)

09:00: Estrutura e termodinâmica de solvatação em sistemas complexos.

Palestrante: Leandro Martínez

09:50: Método Monte Carlo aplicado a simulação de sistemas moleculares.

Palestrante: Kaline R. Coutinho

10:30: Coffee Break

11:00: Sessão de Pôsteres (Alunos)

11:40: Apresentações Orais (Alunos)

12:00: Focando em pontos críticos para a melhoria da seleção de alvos e otimização de hit-to-lead.

Palestrante: Marcelo S. Castilho

12:40: Almoço

14:00: Minicursos

21/08/2024 (4ª FEIRA)

09:00: Métodos avançados no planejamento de fármacos baseado em estrutura.

Palestrante: Claudio N. Cavasotto

09:50: Planejamento de fármacos para tratamento de doenças negligenciadas.

Palestrante: Rafaela Salgado

10:30: Coffee Break

11:00: Inteligência artificial no planejamento de fármacos

Palestrante: Isabella A. Guedes

11:40: Atracamento molecular receptor-ligante e triagem virtual em larga escala

Palestrante: Laurent E. Dardenne

12:20: Homenagem Póstuma

12:40: Almoço

14:00: Minicursos

22/08/2024 (5ª FEIRA)

09:00: Modelagem de biomoléculas com métodos semimpíricos de química quântica.

Palestrante: Gerd Bruno

09:50: Estudo computacional do mecanismo catalítico de enzimas que degradam o politereftalato de etileno.

Palestrante: Jerônimo Lameira

10:30: Coffee Break

11:00: Sessão de Pôsteres (Alunos)

11:40: Apresentações Orais (Alunos)

12:00: Aplicação de Dinâmica molecular de biomembranas e carreadores no câncer de mama.

Palestrante: Priscila Capriles

12:40: Almoço

14:00: Minicursos

23/08/2024 (6ª FEIRA)

09:00: Cálculo de energia livre proteína-ligante: métodos alquímicos.

Palestrante: Jorge Hernández González

09:50: Métodos computacionais aplicados ao estudo de interações entre macromoléculas biológicas dependentes do pH.

Palestrante: Ingrid B. Santana Martins

10:30: Coffee Break

11:00: Aplicação e desenvolvimento de métodos computacionais para a descoberta e aprimoramento de biofármacos.

Palestrante: João Hermínio da Silva

11:40: Apresentações Orais (Alunos)

12:00: Encerramento: Busca pelas bases estruturais para as funções biológicas de carboidratos.

Palestrante: Hugo Verli