Ficha catalográfica Universidade Estadual de Campinas Biblioteca da Faculdade de Ciências Médicas Maristella Soares dos Santos - CRB 8/8402

Guerra, João Victor da Silva, 1993-

G937d

Development of a computational platform for structural and functional characterization of biomolecules and binding sites / João Victor da Silva Guerra. — Campinas, SP: [s.n.], 2024.

Orientador: Paulo Sergio Lopes de Oliveira.

Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Ciências Farmacêuticas.

1. Biologia estrutural. 2. Ciência de dados. 3. Plataforma computacional. 4. Sítios de ligação. 5. Dinâmica molecular. I. Oliveira, Paulo Sergio Lopes de, 1969-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Ciências Farmacêuticas. III. Título.

Informações Complementares

Título em outro idioma: Desenvolvimento de plataforma computacional para caracterização estrutural e funcional de biomoléculas e sítios de ligação

Palavras-chave em inglês:

Structural biology

Data science

Computational platform

Binding sites

Molecular dynamics

Área de concentração: Fármacos, Medicamentos e Insumos para a Saúde

Titulação: Doutor em Ciências

Banca examinadora:

Paulo Sergio Lopes de Oliveira [Orientador]

Eduardo Xavier Silva Miqueles Andre Luis Berteli Ambrosio Gustavo Fernando Mercaldi Felippe Mariano Colombari

Data de defesa: 22-03-2024

Programa de Pós-Graduação: Ciências Farmacêuticas

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)

⁻ ORCID do autor: https://orcid.org/0000-0002-6800-442

⁻ Currículo Lattes do autor: https://lattes.cnpq.br/5809550322159439