

VIIEMMSB – PROGRAMAÇÃO 2014

SEGUNDA-FEIRA - 18/08/2014 (Introdução à modelagem molecular e predição de estruturas)

HORA	PALESTRA	PALESTRANTE
09:00 – 10:00	Estado da Arte em Modelagem Molecular de Macromoléculas Biológicas	Raul Grigera
10:00 – 10:45	Campos de Força Clássicos	Bruno Horta
10:45 – 11:00	<i>Coffee-Break</i>	
11:00 – 11:30	Apresentação de pôster	
11:30 – 12:15	Introdução à Predição de Estrutura de Proteínas	Fabio Custódio
12:15 – 13:00	Métodos Avançados para Predição de Estruturas de Proteínas	Priscila Capriles
13:00 – 14:00	Almoço	
14:30 – 19:00	Minicursos	

TERÇA-FEIRA - 19/08/2014 (Métodos clássicos de simulação molecular)

HORA	PALESTRA	PALESTRANTE
09:00 – 10:00	Metodologia de Dinâmica Molecular	Bruno Horta
10:00 – 10:45	O Método Monte Carlo Aplicado à Simulação Biomolecular	Kaline Coutinho
10:45 – 11:00	<i>Coffee-Break</i>	
11:00 – 11:30	Apresentação de pôster	
11:30 – 12:15	Modelos Coarse Grained	Hubert Stassen
12:15 – 13:00	Simulação de Canais de Membrana	Werner Treptow
13:00 – 14:00	Almoço	
14:30 – 19:00	Minicursos	

QUARTA-FEIRA - 20/08/2014 (Interações entre macromoléculas biológicas)

HORA	PALESTRA	PALESTRANTE
09:00 – 10:00	Métodos de Docking Proteína-Proteína	Dave Ritchie
10:00 – 10:45	Interações Proteína-Proteína	Fernando Barroso
10:45 – 11:00	<i>Coffee-Break</i>	
11:00 – 11:30	Apresentação de pôster	
11:30 – 12:15	Métodos Quânticos e Parametrizações Semi-Empírica	Gerd Bruno
12:15 – 13:00	Modelagem de Glicoproteínas	Hugo Verli
13:00 – 14:00	Almoço	
14:30 – 19:00	Minicursos	
19:00 – 21:00	<i>Cocktail</i>	

QUINTA-FEIRA – 21/08/2014 (Planejamento racional de fármacos)

HORA	PALESTRA	PALESTRANTE
09:00 – 09:45	Métodos para o Planejamento Racional de Fármacos	Maurício Santanna
09:45 – 10:30	Metodologias de Docking Receptor-Ligante	Laurent Dardenne
10:30 – 10:45	<i>Coffee-Break</i>	
10:45 – 11:30	Introdução da Flexibilidade da Proteína no Desenho Racional de Fármacos	Osmar N. de Souza
11:30 – 12:15	Triagem Virtual em Larga Escala	Rafaela S. Ferreira
12:15 – 13:00	Aplicações em Desenho Racional de Fármacos	Florian Paes
13:00 – 14:00	Almoço	
14:30 – 19:00	Minicursos	

SEXTA-FEIRA -22/08/2014 (Métodos avançados de simulação)

HORA	PALESTRA	PALESTRANTE
09:00 – 09:45	Cálculos Quânticos Ab initio em Biomoléculas	Kleber C. Mundim
09:45 – 10:30	Modelagem Molecular de Biomembranas	Thereza Soares
10:30 – 10:45	<i>Coffee-Break</i>	
10:45 – 11:30	Metadinâmica: Teoria e Aplicações	Ernesto Caffarena
11:30 – 12:15	Simulação de Movimentos em Larga Escala Utilizando Técnica de Modos Normais	Paulo Ricardo
12:15 – 13:00	Predição de Estruturas de Proteínas Utilizando o Algoritmo GSA	Tácio Fernandes
13:00 – 14:00	Almoço	
14:30 – 17:30	Apresentação oral de trabalhos selecionados	
17:30 – 18:30	Papel do Solvente na Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos	Raul Grigera
18:30 – 19:00	Encerramento	

VIIEMMSB – PROGRAMAÇÃO 2014**18 – 21/08/2014 (Minicursos Básicos)**

HORA	MINICURSO	PROFESSOR(A)
14:30 – 19:00	Dinâmica Molecular Básica (Programa NAMD)	Diego Gomes, Pedro Torres e Tácio Fernandes
14:30 – 19:00	Métodos de Docking Receptor-Ligante (Programa DockThor)	Camila Magalhães e Isabella A. Guedes
14:30 – 19:00	Predição de Estruturas de Proteínas: Modelagem Comparativa Predição de Estruturas de Proteínas: Ab initio	Priscila Capriles, Fábio Custódio e Marx G. van der Linden
14:30 – 19:00	Cálculo de Modos Normais em Proteínas	Paulo R. Batista e Maurício Costa
14:30 – 19:00	Simulação de Proteínas de Biomembranas	Hubert Stassen
14:30 – 19:00	Cálculos Quânticos de Estrutura Eletrônica Semi-Empíricos	Gerd Bruno e Maurício SantAnna

VIIEMMSB – PROGRAMAÇÃO 2014**18 – 20/08/2014 (Minicurso Avançado)**

14:30 – 16:30	Protein-Protein Docking Protein Structural Alignment and Classification	Dave Ritchie, Diego Gomes e Manuela Leal da Silva
17:00 – 19:00	Métodos de Amostragem Estendida para Cálculos de Perfis de Energia Livre	Ernesto Caffarena e Alexandre S. de Araujo