

# **Relatório de Atividades Desenvolvidas em 2022**

DR. ADOLFO HENRIQUE DE MORAES SILVA

## **Relatório de Atividades Desenvolvidas em 2022**

Documento necessário para abertura do processo de progressão de professor adjunto **C2 para C3** do docente Dr. Adolfo Henrique de Moraes Silva

Belo Horizonte - 2023

## SUMÁRIO

<b>APRESENTAÇÃO</b> .....	5
<b>2 ATIVIDADES DIDÁTICAS</b> .....	5
<b>3 ATIVIDADES DE PESQUISA ou EXTENSÃO</b> .....	6
<b>3.1 Projetos de Pesquisa cadastrados no PPGQ-UFMG</b> .....	6
<b>3.2 Projetos de Extensão aprovados na Câmara Departamental e cadastrados no CENEX</b> .....	6
<b>3.2 Projetos de Pesquisa e recursos aprovados</b> .....	7
<b>3.3 Atividades de extensão</b> .....	10
<b>4 ORIENTAÇÕES</b> .....	11
<b>4.1 Orientações Concluídas</b> .....	11
<b>4.2 Orientações em andamento</b> .....	12
<b>5 PRODUÇÃO CIENTÍFICA, TÉCNICA OU DE INOVAÇÃO</b> .....	13
<b>5.1 Artigos publicados no período 2021-2023</b> .....	13
<b>5.2 Resumos publicados em anais de eventos 2021-2023</b> .....	13
<b>6 PARTICIPAÇÃO EM BANCAS ACADÊMICAS</b> .....	13
<b>7 CAPACITAÇÃO PROFISSIONAL</b> .....	14
<b>7.1 Cursos de curta duração</b> .....	14
<b>8 ATIVIDADES ACADÊMICAS E ADMINISTRATIVAS</b> .....	14
<b>8.1 Comissões</b> .....	14
<b>8.2 Revisor de Periódico</b> .....	15

## APRESENTAÇÃO

Este documento visa apresentar as atividades de pesquisa, ensino e extensão desenvolvidas pelo Professor Dr. Adolfo Henrique de Moraes Silva no período compreendido entre março de 2021 até março de 2023. O documento está dividido em sete capítulos.

## 2 ATIVIDADES DIDÁTICAS

### 2.1 Encargos didáticos: primeiro semestre de 2022

As letras “T” e “P” apresentadas nas tabelas abaixo se referem ao tipo da aula: teórica, T, e prática, P.

Código	Nome	Nível	Turma	Tipo	CH Total	CH semanal	Horas dadas
QUI219	Espectroscopia	Grad.	TM	T/P	75	5	15
QUI219	Espectroscopia	Grad.	TF	T/P	75	5	15
QUI808	Físico-Química Avançada I	Pós	R	T	60	4	60
QUI616	Elementos de Físico Química	Grad.	PT1A	P	15	2	15
QUI616	Elementos de Físico Química	Grad.	PTUA	P	15	2	15

CH semanal Total do docente: 8 horas

CH semestral Total do docente: 120 horas

### 2.2 Encargos didáticos: segundo semestre de 2022

As letras “T” e “P” apresentadas nas tabelas abaixo se referem ao tipo da aula: teórica, T, e prática, P.

Código	Nome	Nível	Turma	Tipo	CH Total	CH semanal	Horas dadas
QUI219	Espectroscopia	Grad.	TF	T/P	75	5	15
QUI810	Princípios teóricos-práticos da interação proteína-ligante	Pós.	F	T/P	60	4	30
QUI808	Físico-Química Avançada I	Pós	R	T	60	4	60

QUI616	Elementos de Físico Química	Grad.	PT1A	P	15	2	15
QUI616	Elementos de Físico Química	Grad.	PTUA	P	15	2	15

CH semanal Total do docente: 9 horas

CH semestral Total do docente: 135 horas

### 3 ATIVIDADES DE PESQUISA ou EXTENSÃO

#### 3.1 Projetos de Pesquisa cadastrados no PPGQ-UFMG

1. Diversidade conformacional e estados excitados de proteínas carreadoras de esteroides e enzimas envolvidas na biossíntese de antibióticos por espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear Diversidade conformacional e estados excitados de proteínas carreadoras de esteroides e enzimas envolvidas na biossíntese de antibióticos por espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear.
2. Caracterização estrutural e de dinâmica molecular de proteínas do Vírus da Dengue e da Zika. Primeiro passo para o desenvolvimento de novas propostas vacinais e novos antivirais.
3. Caracterização da correlação entre mutações em genes da proteína Troponina C cardíaca encontrada em pacientes com Cardiomiopatia Hipertrófica, com modificação estruturais, na dinâmica molecular e na atividade dessa proteína.
4. Desenvolvimento de metodologias espectroscópicas para a avaliação da atividade da enzima ABL quinase e aplicação na identificação de novos quimioterápicos para Leucemia mielóide crônica

#### 3.2 Projetos de Extensão aprovados na Câmara Departamental e cadastrados no CENEX

Título do Projeto de Extensão: *Análise de amostras por espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear*. Descrição: projeto de extensão visando a prestação de serviço de análise de amostras diversas por espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) para pessoas físicas, para empresas e para instituições de ensino e pesquisa públicas e privadas, além do oferecimento de cursos e treinamentos relacionados a RMN. Este projeto será desenvolvido no Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear de Alta Resolução, LIPq-LAREMAR, localizado no Departamento de Química (DQ), do Instituto de Ciências Exatas (ICEX) da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG). O LAREMAR é credenciado como laboratório multiusuário pela Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP) e pela Pró-Reitoria de Pesquisa (PRPq) como Laboratório Institucional de Pesquisa (LIPq). Desde o início de seu funcionamento em 1995, o LAREMAR se caracterizou como multiusuário, atendendo instituições federais, estaduais e privadas. Atualmente, ele continua sua atuação em diferentes áreas do conhecimento que envolvem aplicações em Química, Física, Farmácia, Medicina Veterinária, Engenharia, Bioquímica, Fisiologia, Ciências dos Materiais, Belas Artes, prestando

serviços para empresas e instituições de dentro e fora do Estado de Minas Gerais. O principal objetivo deste projeto é atender a demanda de análises diversas por RMN para pessoas físicas, empresas e instituições de pesquisa e ensino.

Situação: Em andamento Natureza: Projeto de extensão

Integrantes: **Adolfo Henrique de Moraes Silva (Coordenador)**; Jarbas Magalhães Resende; Ivana Lula;

### 3.2 Projetos de Pesquisa e recursos aprovados

1. Rede Mineira de Imunobiológicos FAPEMIG. Posição: membro da equipe. A Rede Mineira de Imunobiológicos é fruto da colaboração de vários grupos de pesquisa de Instituições da capital e do interior que buscam preencher uma lacuna existente entre a ligação da pesquisa básica e o desenvolvimento de produtos imunobiológicos no Estado de Minas Gerais. Essa Rede envolve 6 instituições de Ensino e Pesquisa (UFMG, UFJF, UFSJ, UFOP, FIOCRUZ-MG e UFV). A equipe da Rede é composta de 24 Professores Universitários, sendo 9 deles Pesquisadores nível 1 e 6 nível 2 do CNPq. A Rede estará vinculada a 11 Programas de Pós-graduação no Estado de Minas Gerais e a 12 Instituições estrangeiras demonstrando o caráter internacional dessa iniciativa. Além disso, A Rede já tem como parceiros empresarias em Minas Gerais, o CT-Vacinas (Parque Tecnológico de BH), a Labtest Diagnóstica S.A. e a Nanomark que servirão como ponte para o desenvolvimento dos produtos tecnológicos da Rede. A infraestrutura existente e a integração dos membros da Rede viabilizarão o desenvolvimento dos projetos que seriam de difícil execução de forma individualizada. A Rede Mineira de Imunobiológicos tem a missão de desenvolver produtos para a prevenção e tratamento de doenças inflamatórias infecciosas e não-infecciosas. Essa Rede estará trabalhando no desenvolvimento de vacinas contra a Esquistossomose, Brucelose e Ascaridíase e de potenciais fármacos contra a malária, além de caracterizar os mecanismos da imunidade antiviral do mosquito *Aedes aegypti* envolvidos no controle do Zika vírus com potencial impacto para o desenvolvimento de antivirais. Além dessas atividades, as pesquisas da Rede englobarão estudos do tratamento de doenças inflamatórias que constituem um problema médico em todo o mundo e no Brasil. Entre essas enfermidades incluem doenças inflamatórias crônicas do intestino (colite), Encefalomielite Autoimune Experimental, Artrite, Diabetes e Inflamação Hepática Medicamentosa. Período: 01/01/2018 – em andamento. **Papel desempenhado: integrante;**

2. **Título:** *Estudos dos processos de reconhecimento celular do Vírus da Dengue e da Zika através da caracterização da interação entre a proteína viral glicoproteína E e glicosaminoglicanos por espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear.* Descrição: Os vírus da Dengue, da Zika e demais vírus do gênero flavivírus como o da Febre Amarela formam hoje um dos principais problemas para o sistema de saúde nacional. Áreas como biologia estrutural e química de proteínas aliadas a técnicas experimentais e teóricas de estado da arte, como a Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de biomoléculas, podem contribuir consideravelmente para o entendimento dos processos de infecção, replicação e bloqueio dos flavivírus. Os flavivírus possuem um RNA positivo de fita única que codifica a expressão de 10 proteínas, três delas estruturais e sete não estruturais. A glicoproteína E é uma proteína estrutural e principal componente da superfície da partícula viral dos flavivírus. Dessa forma, a glicoproteína E constitui o primeiro contato entre o vírus, as células hospedeiras do paciente e o seu sistema imune. Ela é também o

principal alvo para a ação dos anticorpos e um dos principais para o desenvolvimento de novos antivirais. A glicoproteína está envolvida diretamente no reconhecimento de receptores em células hospedeiras, como por exemplo, glicosaminoglicanos (GAG's) da matriz extracelular, no processo de fusão da membrana lipídica viral e da endossoma da célula hospedeira e na consequente liberação do material genético para o interior celular. Até o presente momento, nenhum modelo estrutural do complexo proteína E:glicosaminoglicanos foi proposto, e a obtenção dessa informação constitui o primeiro objetivo da equipe proponente. Para isso, a equipe propõe empregar metodologias de estado na arte em espectroscopia de RMN, que permitem identificar o sítio reconhecimento de glicosaminoglicanos na glicoproteína E, identificar quais átomos dos GAG's estão envolvidos na interação, obter parâmetros de distância entre pares de átomos diretamente envolvidos na interação e calcular a afinidade da interação. Aliados a cálculos teóricos, essas metodologias permitirão a obtenção de modelos dos complexos glicoproteína:GAG's de interesse. **Agência de Fomento:** FAPEMIG. **Valor financiado:** R\$ 33.517,05. **Período:** 2019 – 2022. **Papel:** coordenador

3. **Título:** *Abordagem integrada de combate à COVID-19: Desenvolvimento de formulações vacinais, avaliação de imunobiológicos e compostos imunomoduladores.* Descrição: A nossa proposta baseia-se no desenvolvimento de vacinas de DNA, de proteína quimérica e da BCG expressando antígenos virais para induzir imunidade protetora contra SARS-CoV-2; além do uso de imunobiológicos como agentes terapêuticos. CAPES-EPIDEMIAS - Programa Estratégico Emergencial de Prevenção e Combate a Surto, Endemias, Epidemias e Pandemias. **Papel desempenhado: integrante; Agência de fomento:** CAPES. **Período:** 2020- em andamento

4. **Título:** *Manutenção corretiva do espectrômetro de RMN Bruker 400 MHz Avance III nanobay.* Sigla do Projeto: REPRMNNAN. Descrição: A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é uma das técnicas mais abrangentes e poderosas na investigação de aspectos estruturais da matéria, em estudos de dinâmica e como método analítico. A UFMG possui o Laboratório de Ressonância Magnética de Alta Resolução (LAREMAR), sediado no Departamento de Química (DQ). O LAREMAR é reconhecido como laboratório multiusuário pela FINEP e pela Pró-Reitoria de Pesquisa (PRPq) da UFMG, tendo seu caráter multiusuário reconhecido em seu credenciamento como um Laboratório Institucional de Pesquisa (LIPq) da UFMG (apenas cinco laboratórios alcançaram tal credenciamento). Desde o início de seu funcionamento em 1995, o LAREMAR tem caráter multiusuário, atendendo instituições públicas e privadas. Ele atua em diferentes áreas do conhecimento, que envolvem aplicações em Química, Física, Engenharias, Farmácia, Medicina Veterinária, Medicina, Bioquímica, Fisiologia, Ciências dos Materiais, Belas Artes, dentre outras, prestando serviços de RMN para instituições dentro e fora de Minas Gerais. Nessa chamada, requisitamos o reparo do espectrômetro de RMN Bruker 400 MHz Avance III nanobay, que se encontra com o funcionamento comprometido, devido a problemas em seu sistema de proteção elétrico (nobreak), com sua sonda de detecção de 5 mm modelo TXI e com sua unidade de controle de temperatura. O espectrômetro de RMN Bruker 400 MHz Avance III nanobay destina-se a aquisição de experimentos de rotina pela comunidade da UFMG, por pesquisadores de instituições públicas e privadas do estado de Minas e do Brasil. Esse equipamento é operado por pesquisadores e alunos de pós-graduação treinados e credenciados pelo Corpo Técnico do LAREMAR. É o equipamento também utilizado nos cursos de graduação e pós-graduação e para treinamento de novos usuários do LAREMAR.

Atualmente a sonda de detecção de sinal de 5mm modelo TXI, o nobreak e a unidade de controle de temperatura estão fora de operação. Esses componentes do espectrômetro de RMN Bruker 400 MHz Avance III nanoby não são mais passíveis de reparo pelo fabricante, devido ao tempo destes e a inexistência de peças de reposição. Nesse projeto, propomos: a) a reposição da sonda de 5 mm, com gradiente em Z, modelo TXI, que se encontra inoperante, por uma nova sonda de 5 mm, com gradiente em Z, com detecção multinuclear na dimensão indireta modelo BBO, que é compatível com a atual configuração do espectrômetro Bruker 400 MHz Avabce III nanobay; b) a troca do atual nobreak por um nobreak modelo HDS LM S2 - 10KVA - TE: 220V, compatível com as exigências do fabricante; e c) Substituição da unidade de controle de temperatura, que é um acessório padrão desses equipamentos, por uma nova unidade BCU compatível com o atual console instalado. Atualmente, 84 pesquisadores utilizam o espectrômetro Bruker 400 MHz Avance III nanobay, realizando em média, 250 - 300 caracterizações por mês. Os reparos aqui requisitados possibilitarão o pronto retorno do espectrômetro 400 MHz nanobay, o que terá um significativo impacto na comunidade de usuários do LAREMAR oriundos da UFMG, de outras instituições públicas e privadas de Minas Gerais e do Brasil. Agência Financiadora: **FINEP**; Edital: **SOS Equipamentos 2020**. **Valor Aprovado: R\$ 496.546,00**. Integrantes: Adolfo Henrique de Moraes Silva (**responsável**), Jarbas Resende Magalhães (coordenador).

5. **Título do Projeto:** *Desenvolvimento de metodologias espectroscópicas para a avaliação da atividade da enzima ABL quinase e aplicação na identificação de novos quimioterápicos para Leucemia mielóide crônica.* **Descrição:** A enzima Abelson quinase (c-Abl) é uma tirosina quinase que modula vários processos bioquímicos, incluindo polimerização de actina, mudanças estruturais na cromatina, respostas a danos no DNA, e outros processos essenciais para a proliferação, diferenciação, migração, sobrevivência e morte celular. Em células de Leucemia Mielóide Crônica, o gene da ABL é usionado ao da proteína BCR. Essa nova proteína Bcr-Abl é central no desenvolvimento da Leucemia Mielóide Crônica, pois essa proteína híbrida apresenta atividade desregulada e ativa uma série de reações de fosforilação que estimulam a diferenciação, proliferação e mobilidade celular, além de evitar a morte celular programada, garantindo assim a progressão da doença. O primeiro fármaco aprovado para uso no tratamento da LMC foi o imatinibe, um inibidor competitivo do ATP. Porém, o imatinibe mostrou-se falho para aproximadamente um terço dos casos de LMC. Outros fármacos foram desenvolvidos, como o nilotinibe e o dasatinibe. Entretanto, mutações espontâneas pontuais na macromolécula podem tornar esses inibidores ineficazes levando a recidiva da doença. No intuito de projetar novos candidatos a fármaco para o tratamento da LMC é preciso de ensaios de baixo custo e que possam ser empregados na forma de HTS (High throughput Screening) para avaliar a influência dos compostos na atividade da quinase. Um dos métodos que têm sido utilizados é acompanhar a reação com ATP radiomarcado. Outras estratégias incluem ensaios com anticorpos ou reações acopladas com outras enzimas envolvendo compostos fosforescentes/fluorescentes. Essas metodologias empregadas atualmente têm em comum o alto custo e a dificuldade de operação, uma vez que envolvem reagentes com tempo de vida curto como radiofármacos. Neste estudo propomos metodologias de baixo custo para avaliar a atividade da ABL quinase e com possibilidade de escalonamento baseado em um método colorimétrico de detecção indireta da fosforilação de substratos pela ABL. Agência Financiadora: **FAPEMIG**; Edital: **Demanda Universal 2022**. **Valor Aprovado: R\$ 210.543,78**. Integrantes: Adolfo Henrique de Moraes Silva (**coordenador**), Tiago Brandão (integrante), Amanda Silva de Miranda (integrante), Marcelo Andrade Chagas (integrante).



6. **Título:** *Assinalamento dos espectros de RMN da glicoproteína E do vírus da Dengue para o mapeamento de epítomos conformacionais.* **Descrição:** A Dengue é uma das doenças virais mais proeminentes no mundo, com milhões de casos anuais, principalmente em regiões tropicais. No Brasil, a Dengue é um sério problema de saúde pública com grandes impactos financeiros e sociais. O vírus da Dengue, causador da doença, é um flavivírus que possui um RNA de senso positivo que codifica 10 proteínas; sendo três estruturais e 7 não estruturais. Dentre as proteínas estruturais, a glicoproteína E é a mais abundante e a mais externa, sendo o principal alvo para a ação de anticorpos. O desenvolvimento de uma vacina viável e segura contra a Dengue é dificultado pela existência de quatro serotipos e pela ocorrência da chamada reação cruzada de anticorpos, onde um anticorpo gerado por um dos serotipos pode se ligar de forma não neutralizante a outro serotipo e induzir uma maior infecção viral e, conseqüentemente, um quadro clínico mais grave. Uma etapa importante para o desenvolvimento de vacinas contra os serotipos da Dengue e para entender a interação cruzada, é o mapeamento de epítomos conformacionais na glicoproteína E. A ressonância magnética nuclear é uma técnica que permite esse mapeamento através da aquisição de experimentos de interação antígeno-anticorpo. Neste contexto, propomos nesse trabalho, expressar e purificar a glicoproteína E do vírus da Dengue com o intuito de obter a proteína isotopicamente enriquecida com  $^2\text{H}$ , a fim de adquirir experimentos de RMN TROSY, necessários para realizar a caracterização de grandes proteínas. Uma vez obtidos esses espectros e após o assinalamento destes, teremos uma ferramenta poderosa para mapear a interação da glicoproteína E com anticorpos, e mapear epítomos conformacionais. O trabalho e a parceria almejada poderão proporcionar um resultado inédito, que é a caracterização da glicoproteína E do vírus da Dengue por RMN, o que revolucionará a identificação de epítomos conformacionais na glicoproteína E. **Agência de fomento:** CNPq. **Valor:** R\$ 125.375,52. **Integrantes:** Adolfo Henrique de Moraes Silva (**coordenador**), Verônica Silva Valadares (bolsista), Haribabu Hatanari (Harvard Medical School, Harvard University, USA) (supervisor internacional da bolsista).

### 3.3 Atividades de extensão

**1. Coordenador do projeto de extensão** *Análise de amostras por espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear.* Descrição: projeto de extensão visando a prestação de serviço de análise de amostras diversas por espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) para pessoas físicas, para empresas e para instituições de ensino e pesquisa públicas e privadas, além do oferecimento de cursos e treinamentos relacionados a RMN. Este projeto será desenvolvido no Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear de Alta Resolução, LIPq-LAREMAR, localizado no Departamento de Química (DQ), do Instituto de Ciências Exatas (ICEX) da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG). O LAREMAR é credenciado como laboratório multiusuário pela Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP) e pela Pró-Reitoria de Pesquisa (PRPq) como Laboratório Institucional de Pesquisa (LIPq). Desde o início de seu funcionamento em 1995, o LAREMAR se caracterizou como multiusuário, atendendo instituições federais, estaduais e privadas. Atualmente, ele continua sua atuação em diferentes áreas do conhecimento que envolvem aplicações em Química, Física, Farmácia, Medicina Veterinária, Engenharia, Bioquímica, Fisiologia, Ciências dos Materiais, Belas Artes, prestando serviços para empresas e instituições de dentro e fora do Estado de Minas Gerais. O principal objetivo deste projeto é atender a demanda de análises diversas por RMN para pessoas físicas, empresas e instituições de pesquisa e ensino. Situação: Em andamento Natureza: Projeto de extensão

**2. Membro de projeto de extensão (curso); Título:** *DQ-UFMG em Ação: Formação, Qualificação e Aprimoramento de Profissionais da Área de Química e Afins*; **Descrição:** O Departamento de Química (DQ) da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG) é o maior departamento do Instituto de Ciências Exatas da referida Universidade. O quadro de docentes e técnicos administrativos em educação (TAE), em sua maioria doutores e pós-doutores, é altamente qualificado e vêm ao longo dos anos atuando nas mais diferentes atividades de extensão desta Universidade. O DQ, através de seus docentes e do Programa de Pós-graduação em Química, possui convênios e colaborações com diversas Universidades, Empresas e Institutos de Pesquisa do Brasil e do exterior, promovendo com frequência o intercâmbio de docentes, TAEs, discentes de graduação e pós-graduação entre as instituições supracitadas. Essas interações possibilitam que os docentes e TAEs do DQ estejam sempre atualizados em suas áreas de atuação e em sintonia com as demandas do mercado de trabalho. Há mais de 20 anos, o DQ presta serviços à sociedade em diferentes modalidades através do seu Núcleo de Extensão. Entre essas modalidades podemos destacar os Cursos de Extensão que proporcionam à sociedade/profissionais da área de química e afins atividades de atualização, aprimoramento e qualificação. Por outro lado, a interação dos docentes e TAEs do DQ com profissionais da área de química e afins retroalimentam o DQ fornecendo informações sobre as demandas da sociedade (das empresas) e deficiências (ou necessidades de aperfeiçoamento/qualificação) dos profissionais de Química e áreas afins que atuam no mercado. A criação de espaços dentro da Universidade para estes profissionais se faz necessária e é extremamente profícua para ambos: de um lado o profissional de Química ou de áreas afins que se qualifica e do outro a Universidade de cumpre mais uma vez o seu papel social tão relevante que é a formação de quadros qualificados para atender as demandas/anseios da Sociedade. Neste sentido, a oferta de cursos de extensão pelo DQ é uma ação benfazeja para que o conhecimento gerado na Universidade, em particular no DQ, esteja acessível à sociedade e aos profissionais de Química e áreas afins. Este projeto propõe a implementação/oferta de Cursos de Extensão do DQ de forma sistematizada com o objeto de que, no mínimo, dois Cursos de Extensão da área de Química e afins sejam oferecidos por ano a diferentes públicos-alvos (intramuros e extramuros da UFMG). Os cursos serão oferecidos por membros do corpo docente e de TAEs do DQ sem a necessidade de contratação de terceiro para a realização do projeto. O Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG) propõe ofertar anualmente Cursos de Extensão abrangendo diversas áreas da Química. A motivação de tal ação é uma consequência natural da consolidação DQ que é, nacionalmente e internacionalmente, um dos Departamentos de Química mais atuantes e pujantes do Brasil e da América do Sul. Os cursos serão, na sua maioria, na modalidade presencial. Porém, pretende-se também ofertar cursos na modalidades on-line/remota utilizando-se de sistema de EaD integrado a recursos multimídia com vídeos e animações sobre o conteúdo do curso. Parte-se do pressuposto que a oferta dos cursos, em ambas as modalidades e de forma periódica, beneficiará pessoas de diferentes níveis de instrução, interesse e disponibilidade de tempo. **Período: 2020-2025.**

## **4 ORIENTAÇÕES**

### **4.1 Orientações Concluídas**

## 4.2 Orientações em andamento

1. Coorientação de Mestrado do discente Antônio Carlos Mendagna de Oliveira Junior, Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal de Minas Gerais, título do projeto: *Complexos metálicos com inibidores de enzimas envolvidas no desenvolvimento do câncer*, Período: 01/03/2019 – em andamento;
2. Coorientação de mestrado do discente Philipe de Oliveira Fernandes. Programa de Pós-graduação em Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal de Minas Gerais, Título do projeto: *Caracterização da interação entre a proteína ABL quinase e compostos ativos contra leucemia mieloide crônica através de técnicas computacionais e ressonância magnética nuclear*. Período: 2020 – em andamento
3. Orientação de Doutorado da discente Verônica Silva Valadares, Programa de Pós-Graduação em Bioquímica e Imunologia, Universidade Federal de Minas Gerais, título do projeto: *Caracterização da interação entre a proteína TcmN e compostos análogos ao substrato, a intermediários e produtos*. Período: 2020-2024;
4. Coorientação de Doutorado da discente Karen Stephanie Santos, Programa de Pós-Graduação em Química Biológica, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Título do Projeto: *Caracterização da relação entre estrutura, dinâmica molecular, estabilidade e função das proteínas TTHA0949 e (S)-Norcoclaurina Sintase*. Período: 2020-2024;
5. Coorientação de Doutorado do discente Aladim Fernandes Gomes Júnior, Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal de Minas Gerais. Título do Projeto: “Dissecação do espectro de ação e mecanismo de catálise da salicilato hidroxilase”. Período: 2022-2026;
6. Orientação de doutorado do discente Brunno Augusto Salvati, Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal de Minas Gerais. Título: Biocatalise da reação de Picket-Spengler entre dopamina e aldeídos e cetonas pela enzima (S)-Norcoclaurina Sintase. 2021 – em andamento;
7. Orientação de doutorado do discente Yan Ferraz Ximenes Ladeira, Programa de pós-graduação em Química, Universidade Federal de Minas Gerais. Título: Desenvolvimento de metodologias de imobilização de enzimas em matrizes de baixo custo. Período: 2021 – em andamento;
8. Orientação de doutorado do discente Diego Magno Martins. Programa de Pós-graduação em Química, Universidade Federal de Minas Gerais. Título: Desenvolvimento de novas estratégias de identificação de inibidores da enzima ABL cinase. Período 2022 – em andamento;
9. Orientação de iniciação científica do discente Augusto Sérgio Lino Gonçalves. Graduação em Química, Universidade Federal de Minas Gerais. Título: Domínio NTD da proteína nucleocapsídica como alvo para a identificação de candidatos a antivirais contra o SARS COV II. Período: 2021 – em andamento

## 5 PRODUÇÃO CIENTÍFICA, TÉCNICA OU DE INOVAÇÃO

### 5.1 Artigos publicados no período 2021-2023

1. **Moraes, Adolfo H.**; VALENTE, ANA PAULA. Conformational dynamics and kinetics of protein interactions by nuclear magnetic resonance. *Journal of Magnetic Resonance Open* , 2023.
2. VALADARES, VERONICA S.; MARTINS, LUAN C.; **Moraes, Adolfo H.**; CINO, ELIO A. Characterization of the interaction between TcmN and product analogs. **BIOPHYSICAL JOURNAL**. , v.121, p.51a - , 2022;
3. **MORAES, ADOLFO H.**; FONSECA, FLÁVIO GUIMARÃES. Editorial overview: Special issue on virus structure and expression in current opinion in virology. **Current Opinion in Virology**. , v.52, p.68 - 70, 2022;

### 5.2 Resumos publicados em anais de eventos 2021-2023

1. VALADARES, V. S.; **MORAES, ADOLFO H**  
CARACTERIZAÇÃO DA INTERAÇÃO DO DOMÍNIO N-TERMINAL DA TETRACENOMICINA ARO/CYC COM LIGANTES POR RMN In: XVII Jornada Brasileira de Ressonância Magnética, 2022, Fortaleza. **Anais da Jornada Brasileira de Ressonância Magnética**. Rio de Janeiro: Galoá Anais e Proceedings, 2022. v.3.
2. **MORAES, ADOLFO H.** Dinâmica conformacional de proteínas entre micro e milissegundos por RMN: impactos para a reconhecimento molecular, a estabilidade e a agregação de proteínas In: XVII Jornada Brasileira de Ressonância Magnética, 2022, Fortaleza. **Anais da Jornada Brasileira de Ressonância Magnética**. , 2022. v.3.

## 6 PARTICIPAÇÃO EM BANCAS ACADÊMICAS

### Mestrado

1. MAGALHAES, M. T. Q.; SANTOS, B. P. O.; **MORAES, A.**; VERLY, R. M.; BLEICHER, L. Participação em banca de Victor Mendonça de Rezende Fabri. **Validação e caracterização biofísica de dois epítomos do SARS-CoV-2**, 2022 (Bioinformática) Universidade Federal de Minas Gerais;

### Doutorado

1. Participação na banca de doutorado de Lucas Raposo Carvalho. Título da Tese: Estudos estruturais, de interação com membrana e biológicos de derivados peptídicos da PS-O1 e LyeTx I-b. Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal de Minas Gerais.

### Qualificação de Doutorado

1. **Moraes, A. H.**; VERLY, R.; MUNHOS, V. H. O. Participação em banca de KELTON RODRIGUES DE SOUZA,. **Estudos Biofísicos e Conformacionais de Peptídeos Bioativos**

**Derivados da Família das Piscidinas em Meios Miméticos de Membrana**, 2022 (Programa de Pós-graduação Multicêntrico em Química) Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri - Campus JK..

## **Graduação**

1. **Moraes, A. H.**; PEREIRA-MAIA, ELENE C.; LIMA, G. F. Participação em banca de Júlia Resende Lopes Silva. **COMPLEXOS DE RUTÊNIO (II) COM SULFONAMIDAS PARA O TRATAMENTO DE CÂNCER: CARACTERIZAÇÃO E REATIVIDADE EM SOLUÇÃO**, 2022. (Química Tecnológica) Universidade Federal de Minas Gerais

## **7 CAPACITAÇÃO PROFISSIONAL**

### **7.1 Cursos de curta duração**

1. Curso de curta duração em Purificação de Produtos Biotecnológicos. (Carga horária: 45h). Fundação Biominas, BIOMINAS, Belo Horizonte, Brasil

## **8 ATIVIDADES ACADÊMICAS E ADMINISTRATIVAS**

### **8.1 Comissões**

1. Membro da Comissão responsável pelo Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear de Alta Resolução (LAREMAR) desde 01/10/2016;
2. Membro do Comitê Gestor do Laboratório Institucional de Pesquisa da UFMG – LAREMAR - desde 2019;
3. Membro do Corpo Técnico do Laboratório Institucional de Pesquisa da UFMG – LAREMAR desde 2019;
4. Membro da Câmara departamental do Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais. Mandato: 2021 – 2023;
5. Presidente da comissão de retorno das atividades práticas do Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais. Mandato: 2021;
6. Membro da comissão de elaboração da prova do exame unificado de pós-graduação em Química. Representante do Departamento de Química da UFMG -setor de físico-química. Período: 2022 – em andamento;
7. Membro da comissão de seleção de teses do Programa de Pós-graduação em Química da Universidade Federal de Minas Gerais para o prêmio CAPES de tese. Período: 2022 – em andamento;
8. Membro do Comitê de usuários do Núcleo de Prestação de Serviços do Departamento de Química da UFMG - 2022 - atual

## 8.2 Revisor de Periódico

2021 - BIOCHEMICAL JOURNAL (0264--602).

2021 - 2022 Current Opinion in Virology (**guest editor**)

2022 - JOURNAL OF MOLECULAR MODELING.

2022- BRAZILIAN JOURNAL OF MICROBIOLOGY

2021 - JOURNAL OF ADVANCED RESEARCH