

ATA REUNIÃO DO COLEGIADO

19/03/2021



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
ICEx - Instituto de Ciências Exatas
Departamento de Química

ATA DA REUNIÃO DO COLEGIADO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA DO INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS REALIZADA EM 19 DE MARÇO DE 2021.

Aos 19 (dezenove) dias do mês de março de 2021 (dois mil e vinte e um), a partir das 13:30 horas, reuniu-se, por videoconferência, utilizando a plataforma *Microsoft Teams*, o Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Química, sob a presidência do Coordenador, Prof. Hélio Anderson Duarte, com a presença dos professores Maria Helena de Araújo, Cleiton Moreira da Silva, Ricardo Mathias Orlando, Fabiano Vargas Pereira, Zenilda de Lourdes Cardeal, Marcelo Machado Viana, Rossimiriam Pereira de Freitas e os representantes discentes Vivian Andrade Luciano, Selma Fabiana Bazan (sem direito a voto) e Leandro Duarte de Almeida. Foram tratados os seguintes assuntos: **1. Informes: a) Processo Seletivo Mestrado e Doutorado. 2021/1. A experiência com a plataforma TestWe foi considerada muito boa, embora o número de candidatos esteja abaixo do esperado (59 candidatos – total). Considera-se que os processos seletivos que ocorreram na pandemia tenham desafios adicionais para os candidatos, o que é um dos principais fatores a serem considerados para o número pequeno de inscritos. b) Visita Profa. Veronica Ortiz. Foi informado sobre o apoio do PPG-Química à vinda da Profa. Veronica Ortiz Alvarenga (visita de 15 dias) junto com o Programa de Pós-Graduação em Ciência de Alimentos (PPGCA). c) Edital PROEX. Foi relatado o apoio do Programa aos projetos ao Edital do PROEX a formação em Extensão universitária no âmbito da PPG-Química: 1000 Cientistas do Futuro e INSPIRATI. d) Plano de Retorno da UFMG. O Prof. Hélio relatou o retorno à etapa zero do Plano de Retorno, devido ao agravamento do número de casos de Covid-19. e) Novo edital para bolsas do CNPq. Esse órgão de fomento liberou novo edital de bolsas, sendo explicado aos membros do Colegiado os trâmites de acesso e aprovação de projetos para acesso às bolsas. f) Vídeo institucional. Na próxima semana, serão lançados dois vídeos nas redes sociais para divulgar nosso site e divulgação de nova grade curricular. 2. Aprovação de ata da reunião anterior. Após leitura, a ata de reunião do dia 05 de março de 2021 foi aprovada por unanimidade. 3. Homologações. 3.1. Cancelamento da disciplina QUI847 - Tópicos em Química Inorgânica Avançada A - Experimentos Básicos de Infravermelho. Após a apresentação do pedido da Profa. Isolda Maria de Castro Mendes, o colegiado deliberou unanimemente pela homologação do cancelamento da disciplina, que seria lecionada no segundo semestre de 2020. 4) Orientação. 4.1. Indicação de Orientador(a). Foram aprovadas as indicações de orientação a seguir: Prof. Rodrigo Lassarote Lavall para a aluna Rafaela Ferreira Oliveira (Doutorado) e do Prof. Diogo Montes Vidal para a aluna Flávia Guimarães Lopes (Mestrado). 4.2. Mudança de Orientação. Foi retirado de pauta para verificação da solicitação do discente. 5. Coorientação. As indicações constantes no anexo I foram aprovadas em bloco. 6. Projetos de Pesquisa. Este item foi retirado de pauta. 7. Solicitação dos representantes discentes. Foi aprovado por unanimidade que seja mantida a exigência de um artigo e suspensa a obrigatoriedade do segundo artigo/produto para todos os alunos que têm previsão para defesa até final de fevereiro de 2022. Em relação à nova grade curricular e a mudança nos créditos, será solicitado o laudo de todos os alunos que entraram em 2020/1 para verificação individual das demandas. 8. Qualificação. Foram aprovados por unanimidade os pareceres constantes nas solicitações para defesa do exame de qualificação dos doutorandos Bruna de Almeida Martins, Camila Batista Pinto, Caroline Duarte Prates, Felipe Silva Carvalho, José Geraldo Mendes Castro Júnior, Selma Fabiana Bazan e Tarciane da Silva Pinto. 9. Revalidação de Disciplinas. As solicitações dos alunos Débora Caroline Nunes da Silva, Breno Germano de Freitas Oliveira e João Lucas Isidrio de Oliveira Almeida, assim como os recursos das alunas Ana Luiza de Andrade Querino e Nathany Isabelly Dias Vieira foram aprovadas por unanimidade,**

conforme anexo II. **10. Solicitação de prorrogação de prazo.** Este item foi retirado de pauta em função de decisão do colegiado para todos os estudantes. **11. Trancamento de disciplinas.** Foram aprovadas por unanimidade as solicitações de trancamento parcial das alunas Débora Caroline Nunes da Silva (QUI 819 – Química Analítica Av. I – 2020/2) e Tamires Passini Araújo (QUI 834 – Seminários Departamentais – 2020/2). Nada mais havendo para constar, eu, Simone Gomes, secretária, lavrei a presente ata que foi aprovada pelo Colegiado e segue assinada eletronicamente. Belo Horizonte, 19 de março de 2021. Aprovada em 14/05/2021.



Documento assinado eletronicamente por **Selma Fabiana Bazan, Usuário Externo**, em 14/05/2021, às 14:13, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Leandro Duarte de Almeida, Usuário Externo**, em 14/05/2021, às 14:16, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Fabiano Vargas Pereira, Membro de comissão**, em 14/05/2021, às 14:47, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Rossimiriam Pereira de Freitas, Professora do Magistério Superior**, em 14/05/2021, às 15:01, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Vivian Andrade Luciano, Usuário Externo**, em 14/05/2021, às 15:20, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Zenilda de Lourdes Cardeal, Professora do Magistério Superior**, em 14/05/2021, às 15:28, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Helio Anderson Duarte, Coordenador(a) de curso de pós-graduação**, em 14/05/2021, às 17:13, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Maria Helena de Araujo, Subcoordenador(a)**, em 14/05/2021, às 17:39, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ricardo Mathias Orlando, Servidor(a)**, em 14/05/2021, às 18:00, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Marcelo Machado Viana, Professor do Magistério Superior**, em 14/05/2021, às 20:12, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Cleiton Moreira da Silva, Membro de comissão**, em 19/05/2021, às 12:53, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site
https://sei.ufmg.br/sei/controlador_externo.php?



[acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0](#), informando o código verificador **0727945** e o código CRC **CA16ACF1**.

Referência: Processo nº 23072.225056/2021-60

SEI nº 0727945

Coorientador	No.de Coorientações	Categoria	IQP	Aluno	Nível	Entrada	PARECER
Grasiely Faria de Sousa	1	Colaborador	não se aplica	Elizabeth Luciana Marinho Miguel	Doutorado	2/3/2020	não se aplica
Yuri Machado	0	EXTERNO	9,68	Fabiana de Moura	Doutorado	16/04/2019	Favorável



ASSINATURA DO ALUNO: Nathanny Szobelly Dias Vieira

RESERVADO AO PARECERISTA:

Obs.:

_____ / /

Prof.

PROGRAMA

IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA

DISCIPLINA: Construção, otimização e ancoragem molecular de substâncias bioativas em receptores e enzimas.

CURSO: Programa de Pós-Graduação em Química

PRÉ-REQUISITOS:

- a) Graduação em Química, Farmácia ou áreas afins.
- b) Conexão de internet que permita acompanhar o curso: assistir os vídeos, participar das aulas síncronas, fazer download do material do curso (apoio e programas), responder ao controle de presença e responder o questionário de avaliação da disciplina (pelos links a serem enviados).
- c) Possuir computador pessoal com as seguintes configurações mínimas de hardware: processador i3 ou equivalente (desejável: 7i ou melhor), placa de vídeo com a melhor qualidade possível (de preferência, com memória RAM dedicada), espaço livre no HD para realizar o download dos arquivos e bom desempenho deles (desejável: 20-30% ou mais do HD livre), memória RAM de 4 Gb (desejável 8 Gb, 16 Gb, ou mais).
- d) Possuir versão recente do Sistema Operacional Windows (ou instalação de Virtual Box, para simulação da interface do Windows, caso possua outro sistema operacional: Linux: https://www.virtualbox.org/wiki/Linux_Downloads ou Mac: <https://www.baixaki.com.br/mac/download/virtualbox.htm>). Obs.: Não será ensinado como instalar e usar Virtual Box durante o curso.
- e) Força de vontade e curiosidade para aprender: não precisa ser usuário intermediário ou avançado de computadores e programas, pois vamos, com exceção do Virtual Box, explicar tudo passo-a-passo!
- f) Obs.: Há programas que somente podem ser acessados com e-mail institucional (ex.: *@unesp.br)

CARGA DIDÁTICA: 90 horas

30 horas em sala de aula virtual (12 horas teóricas: slides e exposição oral + 18 horas práticas com uso de computadores pessoais para instalação e utilização de programas específicos para o curso).

60 horas de atividades extra-classe

DURAÇÃO EM SEMANAS:1 semana, condensada em 30 horas, sendo 6 horas por dia e depois mais duas semanas para a realização da prova e de estudos dirigidos.

NÚMERO DE CRÉDITOS:6 créditos.

NÚMERO MÍNIMO DE ALUNOS:Não há limite.

NÚMERO MÁXIMO DE ALUNOS:Não há limite.

PROFESSOR RESPONSÁVEL: Prof Dr. Nailton Monteiro do Nascimento Júnior (UNESP-Araraquara – IQ/DBQO).

DISCIPLINA: Construção, otimização e ancoragem molecular de substâncias bioativas em receptores e enzimas.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

- 1) Introdução à modelagem molecular: problemas que podem ser resolvidos, métodos de cálculo, programas de computador utilizados e infraestrutura necessária.
 - *Definição, estudos de caso, métodos clássicos e quânticos de cálculo, programas que podem ser utilizados para os estudos computacionais e quais as configurações dos equipamentos utilizados.*
- 2) A construção de compostos orgânicos e a otimização estrutural.
 - *Esta etapa será executada com base em um tutorial.*
- 3) Estrutura de biomacromoléculas, onde obter e como analisar. Modelo por homologia e as formas de obtenção.
 - *Estruturas primária, secundária, terciária e quaternária de proteínas. O gráfico de Ramachandram e a qualidade de estruturas cristalográficas de proteínas. Modelagem molecular comparativa e suas limitações. Esta etapa também será executada com base em um tutorial.*
- 4) Estudos de ancoragem molecular. Programas utilizados e como trabalham. Validação por redocagem e por banco de dados de ligantes da literatura.
 - *Estudos de ancoragem molecular e as funções de pontuação associadas. Métodos de validação de um modelo computacional. Esta etapa também será executada com base em um tutorial.*
- 5) Análise dos resultados e edição de figuras representando o complexo ligante-biomacromolécula.
 - *Interações ligantes-biomacromolécula. Esta etapa também será executada com base em um tutorial.*

Principais programas que serão utilizados e/ou abordados no curso

- i) BIOVIA Discovery Studio (<http://accelrys.com/products/collaborative-science/biovia-discovery-studio/>).
- ii) Marvin (<https://chemaxon.com/products/marvin>).
- iii) GOLD (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-discovery/components/gold/>).
- iv) MOPAC2016 (<http://openmopac.net/>).
- v) Protein Data Bank (<http://www.rcsb.org/>).
- vi) RAMPAGE (<http://mordred.bioc.cam.ac.uk/~rapper/rampage.php>).
- vii) National Center for Biotechnology Information (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/>).
- viii) UniProt (<http://www.uniprot.org/>).
- ix) Basic Local Alignment Search Tool (<https://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi>).
- x) SWISS-MODEL (<https://swissmodel.expasy.org/>).
- xi) Swiss-PdbViewer (<https://spdbv.vital-it.ch/>).
- xii) PyMol (<https://pymol.org/2/>).

DISCIPLINA: Construção, otimização e ancoragem molecular de substâncias bioativas em receptores e enzimas.

BIBLIOGRAFIA

- a) Mini cursos e palestras no canal do Youtube do Prof. Nailton Monteiro do Nascimento Júnior
(https://www.youtube.com/channel/UCd3anZPRTIleDFCHNNYomfQ?view_as=subscriber).
- b) Tutoriais e manuais disponíveis nos próprios sítios dos programas supracitados.
- c) Donald J. Abraham & David P. Rotella. Burguer's Medicinal Chemistry, Drug Discovery, and Development. Wiley. 7th Edition. 2010. p, 6416 (Volume 2: Discovering lead molecules).
- d) David A. Williams; Thomas L. Lemke; Victoria F. Roche; S. William Zito. Foye's Principles of Medicinal Chemistry. Wolters Kluwer Health. 7th Edition.
- e) Camille Georges Wermuth. The Practice of Medicinal Chemistry. AP. 3rd Edition.
- f) Eliezer J. Barreiro & Carlos A. M. Fraga. Química Medicinal as Bases Moleculares da Ação dos Fármacos. Artmed. 3a Edição. 2015.
- g) Artigos científicos de periódicos indexados, como, por exemplo: Journal of Chemical Information and Modeling, Journal of Medicinal Chemistry, ACS Medicinal Chemistry Letters, Chemical Reviews, European Journal of Medicinal Chemistry, Bioorganic & Medicinal Chemistry, Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, Bioorganic Chemistry, Molecules, Nature Reviews in Drug Discovery, Mini Reviews in Medicinal Chemistry, Current Medicinal Chemistry, Journal of Molecular Modeling, Química Nova, Revista Virtual de Química, etc.
- h) Hugo Verli. Bioinformática: da Biologia à Flexibilidade Moleculares. SBBq. 1ª ed. E-book gratuito: <https://www.ufrgs.br/bioinfo/ebook/>. (Esta obra foi licenciada sob uma Licença Creative Commons Atribuição-Não Comercial-Sem Derivados 3.0 Não Adaptada.)

DISCIPLINA: Construção, otimização e ancoragem molecular de substâncias bioativas em receptores e enzimas.

CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO E INFORMAÇÕES ADICIONAIS

Serão abordadas as aplicações de estudos computacionais, envolvendo ligantes e biomacromoléculas de interesse químico-medicinal/farmacológico, assim como os conceitos envolvidos: na construção e otimização estruturas de micromoléculas, avaliação e otimização das estruturas cristalográficas de biomacromoléculas (ex.: receptores e enzimas), a modelagem molecular comparativa de moléculas que possuem apenas a sequência primária de aminoácidos a partir de estruturas já conhecidas como molde (modelagem molecular comparativa), a interação ligante-biomacromolécula por meio de funções de pontuação e a análise dos resultados gerados da ancoragem molecular, incluindo a geração e edição de figuras, análise das interações intermoleculares envolvidas com resíduos de amino ácidos de relevância e definição de parâmetros relevantes para a triagem virtual de substâncias potencialmente bioativas ou compreensão da atividade de substâncias que já apresentem atividade comprovada. A validação por redocagem também será discutida e aplicada. Paralelamente, por meio de um tutorial elaborado especialmente para esta finalidade, os alunos realizarão a instalação de programas gratuitos (ou subsidiados via CAPES), serão treinados nas etapas de construção, otimização e ancoragem molecular de substâncias previamente selecionadas em receptores específicos (incluindo a análise e otimização prévia destes receptores), seguido da análise adequada.

Avaliação:

A avaliação da disciplina consistirá em responder um questionário, individualmente, via google formulários, contendo entre 40 e 50 questões. O questionário será enviado na quinta-feira seguinte ao curso (6 dias depois), para ser respondido entre às 18:00 e 20:00 horas (este tempo poderá ser prorrogado para três horas de duração, caso informado durante o curso). O conceito será atribuído com base na pontuação deste questionário e um certificado será emitido, contendo o percentual de acertos (ex.: 42 de 50

questões) e de frequência (ex.: 100%), com base em links para confirmar presença, enviados em momentos restritos do curso. Obs.: Todos receberão o certificado, mas o percentual de presença/frequência e pontuação estão subordinados às normas do programa de pós-graduação, para a aprovação e atribuição do conceito/nota.

Resumo da metodologia do tutorial, a seguir:

A partir de estrutura cristalográfica obtida, via Protein Data Bank, completar os resíduos com o programa spdbv, gerar o gráfico de Ramachandran com o servidor Rampage e usar esta nova estrutura para a ancoragem molecular. Paralelamente, construção, utilizando o programa Discovery Studio, da estrutura do ligante co-cristalizado e de mais 5 a 10 ligantes, retirados de artigos científicos (sugestão: faça a busca deles no ChemBL), com atividade no mesmo sítio ativo, seguido de verificação o estado de protonação (Marvin) e otimização com o método semiempírico PM7 do programa MOPAC2016, através da interface gráfica do Mercury. Por fim, realização da ancoragem molecular (modo rígido) com o programa GOLD (removendo as moléculas de água e demais ligantes) com a função de pontuação ChemPLP, entre 10 e 50 poses para cada ligante, definindo o sítio com coordenadas XYZ e o raio de acordo com o tamanho dos ligantes selecionados. Após a ancoragem molecular, utilizando o programa Discovery Studio ou PyMol para analisar os resultados e discutir as interações, gerando figuras para todas as substâncias analisadas. Discussão, falando quais resíduos estão envolvidos nas interações das substâncias com o sítio ativo.

EMENTA

- 1) Introdução à modelagem molecular: problemas que podem ser resolvidos, métodos de cálculo, programas de computador utilizados e infraestrutura necessária.
- 2) A construção de compostos orgânicos e a otimização estrutural.
- 3) Estrutura de biomacromoléculas, onde obter e como analisar. Modelo por homologia e as formas de obtenção.
- 4) Estudos de ancoragem molecular. Programas utilizados e como trabalham. Validação por redocagem e por banco de dados de ligantes da literatura.

5) Análise dos resultados e edição de figuras representando o complexo ligante-biomacromolécula.

A T E S T A D O

Atestamos que NATHANY ISABELLY DIAS VIEIRA, RG nº MG-16.379.983 - PC-MG/MG, na qualidade de Aluna Especial cursou a(s) disciplina(s) de Programa(s) de Pós-Graduação desta Unidade Universitária, conforme segue:

Programa: Química						
Disciplinas	Ano	Período letivo	Créditos	Carga Horária	Freq	Conceito
PGQ - Construção, otimização e ancoragem molecular de substâncias bioativas em receptores e enzimas - Remota	2020	2º Semestre	6	90	100	A

1 crédito correspondente a 12 horas de atividades programadas até 13/9/99 (Res. UNESP 46, DE 18/6/91)

1 crédito correspondente a 15 horas de atividades programadas a partir de 14/9/99 (Res. UNESP 45, DE 14/9/99)

CONCEITOS:

A - Excelente, com direito a crédito; B - Bom, com direito a crédito; C - Regular, com direito a crédito; D/R - Reprovado; I - Incompleto; T - Transferência; J - Cancelamento.

Araraquara, 12 de janeiro de 2021.

SEÇÃO TÉCNICA DE PÓS-GRADUAÇÃO IQ/Ar



ROBSON ADRIANO LIMA
Supervisor Técnico de Seção - Substituto

Tabela de Solicitação de Validação e Aprovação

Discente	Nível	Instituição	Inglês	Créditos	Reconhecimento	
					Créditos validados	Equivalência
Débora Caroline Nunes da Silva (I)	M	UFMG	-	04	04	
Breno Germano de Freitas Oliveira	D	UFMG	-	21	21	

(I) - cursada como Isolada

Tabela de Solicitação de Validação e Aprovação Externo

Discente	Nível	Instituição	Disciplina	Créditos	Reconhecimento	
					Créditos validados	Equivalência
João Lucas Isidio de Oliveira Almeida	D	UECE	Bioestatística	03	0	
			Métodos Experimentais de Análises II	03	0	
			Estágio de docência I*	02	02	sim
			Propriedade Intelectual	02	02	

Total: 04 Créditos

*Estágio em Docência I do aluno João Lucas é equivalente a nossa Docência II, confirmado tanto pela professora Roberta e Gilson (este por e-mail).

REVALIDAÇÃO DE DISCIPLINA

Solicito a revalidação dos créditos das disciplinas abaixo, cursadas na Instituição: Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” Anexo, encontram-se os programas analíticos com carga horária, número de créditos e bibliografia.

Aluno: Ana Luiza de Andrade Querino Data: 14 / 01 / 2021

Código	Disciplina	Ano/ Semestre	CH	CR	Nota/ Conceito	Reservado ao Parecerista		
						Parecerista	Créditos Revalidados	Equivalente?
PGQ	Construção, otimização e ancoragem molecular de substâncias bioativas em receptores e enzimas.	2020/2	90	6	A			

EXAME DE LÍNGUA ESTRANGEIRA: Inglês () Revalidado pelo Colegiado () sim () não

