



LUCIANNA HELENE SILVA
DOS SANTOS

Dra. en Ciencias



lsilva@pasteur.edu.uy

SNI

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas

Categorización actual: Iniciación (Activo)

Fecha de publicación: 03/03/2026

Última actualización: 03/03/2026

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Institut Pasteur de Montevideo/ Institut Pasteur de Montevideo / Laboratorio de Simulaciones Biomoleculares / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo / Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Laboratorio de Simulaciones Biomoleculares

Dirección: Mataojo 2020, Montevideo, Uruguay / 11400

País: Uruguay / Montevideo / Montevideo

Correo electrónico/Sitio Web: lsilva@pasteur.edu.uy <https://pasteur.uy/laboratorios/simulaciones-biomoleculares/>

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Programa de Pós Graduação em Biologia Computacional e Sistemas (2012 - 2016)

Fundação Oswaldo Cruz - Rio de Janeiro , Brasil

Título de la disertación/tesis/defensa: Planejamento racional aplicado à busca e otimização de inibidores do HIV-1 e doença de Chagas

Tutor/es: Ernesto Raúl Caffarena y Rafaela Salgado Ferreira

Obtención del título: 2016

Sitio web de la disertación/tesis/defensa: <https://www.arca.fiocruz.br/handle/icict/17690>

Financiación:

CAPES , Brasil

MAESTRÍA

Programa de Pós-Graduação em Ciências Computacionais (2010 - 2012)

universidad estadual de rio de janeiro , Brasil

Título de la disertación/tesis/defensa: Teoria de Controle Ótimo com Aplicações a Sistemas Biológicos

Tutor/es: Maria Hermínia de Paula Leite Mello

Obtención del título: 2012

Sitio web de la disertación/tesis/defensa: <http://www.btdt.uerj.br/handle/1/7687>

Financiación:

Fundacao Carlos Chagas Filho de Amparo a Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro , Brasil

GRADO

Instituto de Matemática e Estatística (2005 - 2009)

universidad estadual de rio de janeiro , Brasil

Título de la disertación/tesis/defensa: Estudo matemático do efeito da poluição sobre populações de plantas aquáticas

Tutor/es: Solange Rutz

Obtención del título: 2009

Formación complementaria

CONCLUIDA

POSDOCTORADOS

Postdoctorado en Bioinformática (2018 - 2022)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Federal de Minas Gerais , Brasil
Financiación:
CAPES , Brasil

Postdoctorado en computación (2016 - 2017)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Federal de Minas Gerais , Brasil
Financiación:
CAPES , Brasil

Idiomas

Inglés

Entiende muy bien / Habla muy bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

Portugués

Entiende muy bien / Habla muy bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

Español

Entiende bien / Habla regular / Lee bien / Escribe regular

Áreas de actuación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Biológicas/Bioquímica y Biología Molecular /Bioquímica computacional

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información /Ciencias de la Información y Bioinformática
/Bionformática estructural

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Biológicas/Biofísica /Biofísica teórica

Actuación profesional

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - PROGRAMA DE DESARROLLO DE LAS CIENCIAS BÁSICAS - URUGUAY

Área Química (PEDECIBA)

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (07/2023 - a la fecha)

15 horas semanales
Investigadora Activa, Grado 3

SECTOR ORGANIZACIONES PRIVADAS SIN FINES DE LUCRO/SOCIEDADES CIENTÍFICO-TECNOLÓGICAS - INSTITUT PASTEUR DE MONTEVIDEO - URUGUAY

Institut Pasteur de Montevideo / Laboratorio de Simulaciones Biomoleculares

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (04/2022 - a la fecha) Trabajo relevante

Investigadora adjunta 40 horas semanales / Dedicación total

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Implementación del método de pH constante utilizando el campo de fuerza SIRAH (04/2022 - a la fecha)

Ph constante es una metodología de dinámica molecular que utiliza el parámetro de pH para muestrear protonaciones de residuos en proteínas. Usando campos de fuerza de grano grueso como SIRAH, podemos reducir los detalles del modelo a los grados de libertad básicos del sistema, lo que permite que las simulaciones atraviesen los límites más rápido.

Aplicada

40 horas semanales , Integrante del equipo

Equipo: Lucianna Helene Silva Santos , Sergio Pantano

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Dinámica molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / simulaciones grano grueso

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / interacciones proteína-proteína

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática / Bioinformática estructural

Estabilidad de partículas virales por técnicas de modelado molecular y simulaciones (04/2022 - a la fecha)

Con protocolos de simulación específicos, aplicamos diversas técnicas para estudiar la dinámica de maduración y activación de virus completos como Flavivirus y Circovirus.

Aplicada

40 horas semanales , Integrante del equipo

Equipo: Lucianna Helene Silva Santos , Sergio Pantano

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / dinámica molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / acoplamiento molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / interacciones proteína-proteína

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática / Bioinformática estructural

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - BRASIL

Universidad Federal de Minas Gerais

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Becario (02/2018 - 03/2022) Trabajo relevante

Postdoctorado 40 horas semanales / Dedicación total

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Estudio de sitios de del complejo NS2B-NS3 del virus ZIKA (03/2020 - 03/2022)

Aplicación de dinámica molecular a los sitios activos y alostéricos del complejo NS2B-NS3 del virus del Zika para descubrir interacciones importantes.

Aplicada

30 horas semanales , Integrante del equipo

Equipo: Lucianna Helene Silva Santos

Desarrollo de fármacos asistido por métodos computacionales (02/2018 - 02/2020)

Uso de métodos computacionales como modelado molecular, cálculo de propiedades físico-químicas, acoplamiento molecular y dinámica molecular para el descubrimiento de compuestos activos para la enfermedad de Chagas, enfermedad del sueño y Zika.

Aplicada

30 horas semanales , Integrante del equipo

Equipo: Lucianna Helene Silva Santos

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Desarrollo de fármacos basado en estructuras: producción y caracterización de la estructura tridimensional de posibles estructuras moleculares en complejo con candidatos a fármacos contra covid-19 (07/2020 - 03/2022)

La pandemia mundial de COVID-19 provocada por la coronavirus SARS-CoV-2 exige con urgencia nuevos antivirales. La proteasa principal (Mpro) y la proteasa similar a la papaína (PLpro) son objetivos farmacológicos atractivos entre los coronavirus debido a su papel esencial en el procesamiento de las poliproteínas traducidas del virus ARN. En este estudio, examinamos virtualmente compuestos y derivados frente a Mpro y PLpro del SARS-CoV-2. Los compuestos seleccionados se evalúan en ensayos bioquímicos para confirmar nuevas clases de inhibidores específicos de Mpro y PLpro.

30 horas semanales

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

RRHH formados en el proyecto:

Maestría/Magister:3

Doctorado:2

Financiación:

CAPES/CNPq/MEC, Brasil, Apoyo financiero

Equipo: Lucianna Helene Silva Santos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

Aplicación de cálculos de cambio de energía libre basados en dinámica molecular en el descubrimiento de fármacos (03/2020 - 03/2022)

El objetivo principal de este proyecto es proponer nuevos inhibidores competitivos para las principales dianas de enfermedades desatendidas como la enfermedad de Chagas (Cruzaína), Zika (NS3) y la enfermedad del sueño (Rhodesaína), utilizando enfoques in silico de bioinformática estructural y biología computacional. Con estos enfoques se obtendrán estimaciones de afinidad de decenas de moléculas dentro de una campaña de optimización de uno o un pequeño grupo de prototipos. Se llevarán a cabo los siguientes pasos: (i) cuantificar el proceso de unión de pequeños sistemas de un receptor biológico y una pequeña molécula orgánica, haciendo un total de alrededor de 50.000 partículas, para decenas de moléculas seleccionadas mediante la técnica de fuerza de polarización adaptativa; (ii) proponer modificaciones estructurales en compuestos con similitud a los compuestos líderes más prometedores, creando posibles análogos optimizados de la serie; (iii) Evaluar la diferencia de afinidad entre los compuestos generados a partir del cálculo de la perturbación de energía libre, con el fin de priorizar entre los análogos para la evaluación experimental

20 horas semanales

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

RRHH formados en el proyecto:

Maestría/Magister:1

Doctorado:3

Financiación:

CAPES/CNPq/MEC, Brasil, Apoyo financiero

Equipo: Lucianna Helene Silva Santos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

Desarrollo de inhibidores de proteasas para el tratamiento de enfermedades desatendidas (02/2018 - 02/2020)

En este proyecto pretendemos obtener compuestos para el tratamiento de las enfermedades de Chagas y Zika, enfermedades desatendidas para las que urge desarrollar nuevas terapias. Se proponen estrategias basadas en estructuras moleculares esenciales para los agentes etiológicos: proteasas de cruzaina de Trypanosoma cruzi y NS2B-NS3 del virus Zika (NS2B-NS3ZV). De esta forma, el objetivo general de la propuesta es la optimización de inhibidores enzimáticos en cuanto a su potencia frente a enzimas y actividad en modelos celulares, mediante un enfoque moderno de química médica y computacional, el diseño racional de fármacos en base a la estructura de las proteínas. Se utilizarán como puntos de partida inhibidores de cruzaina descubiertos recientemente en nuestro grupo de investigación e inhibidores de NS2B-NS3ZV u otras proteasas homólogas de otros flavivirus, ya descritos en la literatura.

30 horas semanales

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

RRHH formados en el proyecto:

Maestría/Magister:2

Doctorado:3

Financiación:

CAPES/CNPq/MEC, Brasil, Apoyo financiero

Equipo: Lucianna Helene Silva Santos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: Sin horas

Carga horaria de investigación: Sin horas

Carga horaria de formación RRHH: Sin horas

Carga horaria de extensión: Sin horas

Carga horaria de gestión: Sin horas

Producción científica/tecnológica

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

Structural and dynamic properties of guanosine-analog binding to 2'-deoxyguanosine-II riboswitch: a computational study (Completo, 2025)

DEBORAH ANTUNES, LUCIANNA H. S. SANTOS, ERNESTO RAUL CAFFARENA, ANA CAROLINA RAMOS GUIMARÃES

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 43 p.:9654 - 9675, 2025

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: United kingdom

ISSN: 07391102

E-ISSN: 15380254

DOI: [10.1080/07391102.2025.2530092](https://doi.org/10.1080/07391102.2025.2530092)

<https://doi.org/10.1080/07391102.2025.2530092>

WEB OF SCIENCE™ Scopus™

SIRAH Tools GUI: An Intuitive Interface for the Analysis of CG Simulations (Completo, 2025)

ANDRÉS BALLESTEROS-CASALLAS, ANTONELLA ALBA, JORGE CANTERO, MARTÍN SOÑORA, LUCIANNA H. S. SANTOS, SERGIO PANTANO

Journal of Chemical Information and Modeling, v.: 65 p.:10797 - 10802, 2025

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: United states

ISSN: 15499596

E-ISSN: 1549960X

DOI: [10.1021/acs.jcim.5c01226](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.5c01226)

<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.5c01226>

Coarse-Grained DNA Models: Bridging Scales Through Extended Dynamics (Reseña, 2025)

MARTÍN SOÑORA , LUCIANNA HELENE SILVA SANTOS , ANTONELLA ALBA , ANDRÉS BALLESTEROS-CASALLAS , SERGIO PANTANO

Wiley Interdisciplinary Reviews Computational Molecular Science, v.: 15 2025

Escrito por invitación

E-ISSN: 17590884

DOI: [10.1002/wcms.70028](https://doi.org/10.1002/wcms.70028)

<https://doi.org/10.1002/wcms.70028>

Challenges in simulating whole virus particles and how to fix them with the SIRAH force field (Completo, 2025) Trabajo relevante

LUCIANNA HELENE SILVA SANTOS , SERGIO PANTANO

Biophysical Reviews, 2025

Lugar de publicación: Germany

Escrito por invitación

ISSN: 18672450

E-ISSN: 18672469

DOI: [10.1007/s12551-025-01305-x](https://doi.org/10.1007/s12551-025-01305-x)

<https://doi.org/10.1007/s12551-025-01305-x>

Unraveling Common Patterns and Differences among Cruzipains through Molecular Dynamics Simulations and Structural Analyses (Completo, 2025)

LUCIANNA HELENE S. SANTOS , AUGUSTO CÉSAR BROILO CAMPOS , VIVIANE CORRÊA SANTOS , ALEXANDRE VICTOR FASSIO , MAURÍCIO G. S. COSTA , RAFAELA SALGADO FERREIRA

ACS Omega, 2025

Lugar de publicación: United states

E-ISSN: 24701343

DOI: [10.1021/acsomega.5c01876](https://doi.org/10.1021/acsomega.5c01876)

<https://doi.org/10.1021/acsomega.5c01876>

Understanding fungal and plant active urea transport systems: Keys from *Aspergillus nidulans* and beyond (Completo, 2024)

ANA RAMÓN , MANUEL SANGUINETTI , LUCIANNA HELENE SILVA SANTOS , SOTIRIS AMILLIS

Biochemical and Biophysical Research Communications, v.: 735 p.:150801 2024

Lugar de publicación: United states

Escrito por invitación

ISSN: 0006291X

E-ISSN: 10902104

DOI: [10.1016/j.bbrc.2024.150801](https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2024.150801)

<https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2024.150801>

Pouring SIRAH on NAMD (Completo, 2024)

JORGE CANTERO , ANDRÉS BALLESTEROS-CASALLAS , LUCIANNA H. S. SANTOS , MARGOT PAULINO , SERGIO PANTANO

The Journal of Physical Chemistry B, v.: 128 p.:11971 - 11980, 2024

Lugar de publicación: United states

Escrito por invitación

ISSN: 15206106

E-ISSN: 15205207

DOI: [10.1021/acs.jpcc.4c03278](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.4c03278)

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.4c03278>

Structural Characterization and Rat Aortic Vascular Reactivity of Bradykinin-Potentiating Peptides (BPPs) from the Snake Venom of *Bothrops moojeni* from Delta do Parnaíba Region, Brazil (Completo,

2024)

SAMUEL R. COSTA , ANDREANNE G. VASCONCELOS , JOSÉ OTÁVIO C. S. ALMEIDA , DANIEL D. R. ARCANJO , ANDERSON DEMATEI , EDER A. BARBOSA , PEDRO COSTA SILVA , THIAGO NASCIMENTO , LUCIANNA H. SANTOS , PETER EATON , JOSÉ ROBERTO S. DE A. LEITE , GUILHERME D. BRAND

Journal of Natural Products, v.: 87 p.:820 - 830, 2024

Lugar de publicación: United states

ISSN: 01633864

E-ISSN: 15206025

DOI: [10.1021/acs.jnatprod.3c00991](https://doi.org/10.1021/acs.jnatprod.3c00991)

<https://doi.org/10.1021/acs.jnatprod.3c00991>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Structure-based discovery of thiosemicarbazones as SARS-CoV-2 main protease inhibitors (Completo, 2023)

VINÍCIUS GONÇALVES MALTAROLLO , ELANY BARBOSA DA SILVA , THALES KRONENBERGER , MARINA MOL SENA ANDRADE , GABRIEL V DE LIMA MARQUES , NEREU J CÂNDIDO OLIVEIRA , LUCIANNA H SANTOS , CELSO DE OLIVEIRA REZENDE JÚNIOR , ANA C CASSIANO MARTINHO , DANIELLE SKINNER , PAVLA FAJTOVÁ , THAÍS H M FERNANDES , EDUARDO DA SILVEIRA DOS SANTOS , POLIANA A RODRIGUES GAZOLLA , ANA P MARTINS DE SOUZA , MILENE LOPES DA SILVA , FABIOLA S DOS SANTOS , STEFÂNIA N LAVORATO , ANA C OLIVEIRA BRETAS , DIOGO TEIXEIRA CARVALHO , LUCAS LOPARDI FRANCO , STEPHANIE LUEDTKE , MIRIAM A GIARDINI , ANTTI POSO , LUIZ C DIAS , LARISSA M PODUST , RICARDO J ALVES , JAMES MCKERROW , SAULO F ANDRADE , RÓBSON R TEIXEIRA , JAIR L SIQUEIRA-NETO , ANTHONY O'DONOGHUE , RENATA B DE OLIVEIRA , RAFAELA S FERREIRA

Future Medicinal Chemistry, v.: 15 p.:959 - 985, 2023

Lugar de publicación: United kingdom

ISSN: 17568919

E-ISSN: 17568927

DOI: [10.4155/fmc-2023-0034](https://doi.org/10.4155/fmc-2023-0034)

<http://dx.doi.org/10.4155/fmc-2023-0034>

Scopus®

Pragmatic Coarse-Graining of Proteins: Models and Applications (Completo, 2023)

LUÍS BORGES-ARAÚJO , ILIAS PATMANIDIS , AKHIL P. SINGH , LUCIANNA H. S. SANTOS , ADAM K. SIERADZAN , STEFANO VANNI , CEZARY CZAPLEWSKI , SERGIO PANTANO , WATARU SHINODA , LUCA MONTICELLI , ADAM LIWO , SIEWERT J. MARRINK , PAULO C. T. SOUZA

Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 19 p.:7112 - 7135, 2023

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: United states

ISSN: 15499618

E-ISSN: 15499626

DOI: [10.1021/acs.jctc.3c00733](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.3c00733)

<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.3c00733>

Scopus®

Evaluating Known Zika Virus NS2B-NS3 Protease Inhibitor Scaffolds via In Silico Screening and Biochemical Assays (Completo, 2023) Trabajo relevante

LUCIANNA H. SANTOS , RAFAEL E. O. ROCHA , DIEGO L. DIAS , BEATRIZ M. R. M. RIBEIRO , MATEUS SÁ M. SERAFIM , JÔNATAS S. ABRAHÃO , RAFAELA S. FERREIRA

Pharmaceuticals, v.: 16 p.:1319 2023

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Switzerland

E-ISSN: 14248247

DOI: [10.3390/ph16091319](https://doi.org/10.3390/ph16091319)

<http://dx.doi.org/10.3390/ph16091319>

Scopus®

Structure-based discovery of novel cruzain inhibitors with distinct trypanocidal activity profiles (Completo, 2023)

VIVIANE CORRÊA SANTOS , PAULO GAIO LEITE , LUCIANNA HELENE SANTOS , PEDRO

GERALDO PASCUTTI , PETER KOLB , FABIANA SIMÃO MACHADO , RAFAELA SALGADO FERREIRA
European Journal of Medicinal Chemistry, v.: 257 p.:115498 2023
Lugar de publicación: Netherlands
ISSN: 02235234
E-ISSN: 17683254
DOI: [10.1016/j.ejmech.2023.115498](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2023.115498)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.ejmech.2023.115498>
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

The SIRAH force field: A suite for simulations of complex biological systems at the coarse-grained and multiscale levels (Completo, 2023)

FLORENCIA KLEIN , MARTÍN SOÑORA , LUCIANNA HELENE SANTOS , EZEQUIEL NAZARENO FRIGINI , ANDRÉS BALLESTEROS-CASALLAS , MATÍAS RODRIGO MACHADO , SERGIO PANTANO
Journal of Structural Biology, v.: 215 p.:107985 2023
Lugar de publicación: United states
ISSN: 10478477
E-ISSN: 10958657
DOI: [10.1016/j.jsb.2023.107985](https://doi.org/10.1016/j.jsb.2023.107985)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jsb.2023.107985>
Scopus®

Bacterial 2'-Deoxyguanosine Riboswitch Classes as Potential Targets for Antibiotics: A Structure and Dynamics Study (Completo, 2022)

DEBORAH ANTUNES , LUCIANNA H. S. SANTOS , ERNESTO RAUL CAFFARENA , ANA CAROLINA RAMOS GUIMARÃES
International Journal of Molecular Sciences, v.: 23 p.:1925 2022
Lugar de publicación: Switzerland
E-ISSN: 14220067
DOI: [10.3390/ijms23041925](https://doi.org/10.3390/ijms23041925)
<http://dx.doi.org/10.3390/ijms23041925>
Scopus®

Substrate Recognition Properties from an Intermediate Structural State of the UreA Transporter (Completo, 2022) Trabajo relevante

MANUEL SANGUINETTI , LUCIANNA HELENE SILVA SANTOS , JULIETTE DOURRON , CATALINA ALAMÓN , JUAN IDIARTE , SOTIRIS AMILLIS , SERGIO PANTANO , ANA RAMÓN
International Journal of Molecular Sciences, v.: 23 p.:16039 2022
Lugar de publicación: Switzerland
E-ISSN: 14220067
DOI: [10.3390/ijms232416039](https://doi.org/10.3390/ijms232416039)
<http://dx.doi.org/10.3390/ijms232416039>
Scopus®

Structure-Based Identification of Naphthoquinones and Derivatives as Novel Inhibitors of Main Protease M^{PRO} and Papain-like Protease PL^{PRO} of SARS-CoV-2 (Completo, 2022) Trabajo relevante

LUCIANNA H. SANTOS , THALES KRONENBERGER , RENATA G. ALMEIDA , ELANY B. SILVA , RAFAEL E. O. ROCHA , JOYCE C. OLIVEIRA , LUIZA V. BARRETO , DANIELLE SKINNER , PAVLA FAJTOVÁ , MIRIAM A. GIARDINI , BRENDON WOODWORTH , CONNER BARDINE , ANDRÉ L. LOURENÇO , CHARLES S. CRAIK , ANTTI POSO , LARISSA M. PODUST , JAMES H. MCKERROW , JAIR L. SIQUEIRA-NETO , ANTHONY J. O'DONOGHUE , EUFRÂNIO N. DA SILVA JÚNIOR , RAFAELA S. FERREIRA
Journal of Chemical Information and Modeling, v.: 62 p.:6553 - 6573, 2022
Lugar de publicación: United states
ISSN: 15499596
E-ISSN: 1549960X
DOI: [10.1021/acs.jcim.2c00693](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.2c00693)
<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jcim.2c00693>
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Thermostabilizing mechanisms of canonical single amino acid substitutions at a GH1 ??glucosidase probed by multiple MD and computational approaches (Completo, 2022)

RAFAEL EDUARDO OLIVEIRA ROCHA , DIEGO CÉSAR BATISTA MARIANO , TIAGO SILVA ALMEIDA , LEON SULFIERRY CORRÉACOSTA , PEDRO HENRIQUE CAMARGO FISCHER , LUCIANNA HELENE SANTOS , ERNESTO RAUL CAFFARENA , CARLOS HENRIQUE DA SILVEIRA , LEONIDA M. LAMP , MONICA LISA FERNANDEZ?QUINTERO , KLAUS ROMAN LIEDL , RAQUEL CARDOSO DE MELO?MINARDI , LEONARDO HENRIQUE FRANÇA DE LIMA

Proteins Structure Function and Bioinformatics, v.: 91 p.:218 - 236, 2022

Lugar de publicación: United states

ISSN: 08873585

E-ISSN: 10970134

DOI: [10.1002/prot.26424](https://doi.org/10.1002/prot.26424)

<http://dx.doi.org/10.1002/prot.26424>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

BR-bombesin: a novel bombesin-related peptide from the skin secretion of the Chaco tree frog (Boana raniceps) with physiological gastric effects (Completo, 2022)

NAYARA ALVES DE SOUSA , MARIELA M. MARANI , ANDRÉ LUÍS FERNANDES LOPES , EMANUELLE MORAIS SILVA , EDER ALVES BARBOSA , ANDREANNE GOMES VASCONCELOS , FELIPE T. B. KUZNIEWSKI , SUELLEN SOUSA LUSTOSA , KARINA PEREIRA GOMES , DIEGO BASILE COLUGNATI , JEFFERSON A. ROCHA , LUCIANNA HELENE SANTOS , MARCELO P. BENQUERER , PATRICK QUELEMES , LEIZ VÉRAS , DANIEL C. MOREIRA , KALINNE KELLY LIMA GADELHA , PEDRO JORGE CALDAS MAGALHÃES , ALEXANDRA PLÁCIDO , PETER EATON , LUCAS NICOLAU , JAND VENES R. MEDEIROS , JOSÉ R. S. A. LEITE

Amino Acids, v.: 54 p.:733 - 747, 2022

Lugar de publicación: Germany

ISSN: 09394451

E-ISSN: 14382199

DOI: [10.1007/s00726-021-03114-4](https://doi.org/10.1007/s00726-021-03114-4)

<http://dx.doi.org/10.1007/s00726-021-03114-4>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Characterization of an Allosteric Pocket in Zika Virus NS2B-NS3 Protease (Completo, 2022)

NAIÁ PORÃ SANTOS , LUCIANNA HELENE SANTOS , MARIANA TORQUATO QUEZADO DE MAGALHÃES , JIAN LEI , ROLF HILGENFELD , RAFAELA SALGADO FERREIRA , LUCAS BLEICHER

Journal of Chemical Information and Modeling, v.: 62 p.:945 - 957, 2022

Lugar de publicación: United states

ISSN: 15499596

E-ISSN: 1549960X

DOI: [10.1021/acs.jcim.1c01326](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c01326)

<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jcim.1c01326>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Rad5 HIRAN domain: Structural insights into its interaction with ssDNA through molecular modeling approaches (Completo, 2022)

BRUNO M. SILVA , LUCIANNA H. SANTOS , JOÃO PAULO P. DE ALMEIDA , MARIANA T. Q. DE MAGALHÃES

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, p.:1 - 14, 2022

Lugar de publicación: United kingdom

ISSN: 07391102

E-ISSN: 15380254

DOI: [10.1080/07391102.2022.2045222](https://doi.org/10.1080/07391102.2022.2045222)

<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2022.2045222>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Synoeca?MP: New insights into its mechanism of action by using NMR and molecular dynamics simulations approach (Completo, 2022)

ELIANE SANTANA FERNANDES ALVES , BRUNO DE PAULA OLIVEIRA DE SANTOS , LETICIA VALVASSORI RODRIGUES , CARLOS DANIEL PEREIRA FREITAS , LUCIANNA HELENE SILVA DOS SANTOS , SIMONI CAMPOS DIAS , OCTÁVIO LUIZ FRANCO , LUCIANO MORAIS LIÃO , MARIANA TORQUATO QUEZADO DE MAGALHÃES

Peptide Science, v.: 115 2022

E-ISSN: 24758817

DOI: [10.1002/pep2.24293](https://doi.org/10.1002/pep2.24293)

<http://dx.doi.org/10.1002/pep2.24293>

pH and non-covalent ligand binding modulate Zika virus NS2B/NS3 protease binding site residues: Discoveries from MD and constant pH MD simulations (Completo, 2021) Trabajo relevante

LUCIANNA H. SANTOS, ERNESTO R. CAFFARENA, RAFAELA S. FERREIRA
Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 40 p.:10359 - 10372, 2021
Lugar de publicación: United kingdom
ISSN: 07391102
E-ISSN: 15380254
DOI: [10.1080/07391102.2021.1943528](https://doi.org/10.1080/07391102.2021.1943528)
<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2021.1943528>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Propedia: a database for protein?peptide identification based on a hybrid clustering algorithm (Completo, 2021)

PEDRO M. MARTINS, LUCIANNA H. SANTOS, DIEGO MARIANO, FELIPPE C. QUEIROZ, LUANA L. BASTOS, ISABELA DE S. GOMES, PEDRO H. C. FISCHER, RAFAEL E. O. ROCHA, SABRINA A. SILVEIRA, LEONARDO H. F. DE LIMA, MARIANA T. Q. DE MAGALHÃES, MARIA G. A. OLIVEIRA, RAQUEL C. DE MELO-MINARDI
BMC Bioinformatics, v.: 22 2021
Lugar de publicación: United kingdom
E-ISSN: 14712105
DOI: [10.1186/s12859-020-03881-z](https://doi.org/10.1186/s12859-020-03881-z)
<http://dx.doi.org/10.1186/s12859-020-03881-z>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

ToxAnalyzer: A user-friendly web tool for interactive data analysis and visualization of chemical compounds from the Comparative Toxicogenomics Database (CTD)? (Completo, 2021)

DANIEL RIBEIRO RODRIGUES, DIEGO CÉSAR BATISTA MARIANO, LUCIANNA HELENE SILVA SANTOS, CARLOS ALBERTO TAGLIATI
Computational Toxicology, v.: 19 p.:100170 2021
ISSN: 24681113
DOI: [10.1016/j.comtox.2021.100170](https://doi.org/10.1016/j.comtox.2021.100170)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.comtox.2021.100170>

Scopus®

Shared Binding Mode of Perrottetinene and Tetrahydrocannabinol Diastereomers inside the CB1 Receptor May Incentivize Novel Medicinal Drug Design: Findings from an *in Silico* Assay (Completo, 2020)

MATHEUS HENRIQUE REIS, DEBORAH ANTUNES, LUCIANNA H. S. SANTOS, ANA CAROLINA RAMOS GUIMARÃES, ERNESTO RAUL CAFFARENA
ACS Chemical Neuroscience, v.: 11 p.:4289 - 4300, 2020
Lugar de publicación: United states
E-ISSN: 19487193
DOI: [10.1021/acschemneuro.0c00547](https://doi.org/10.1021/acschemneuro.0c00547)
<http://dx.doi.org/10.1021/acschemneuro.0c00547>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Proteus: An algorithm for proposing stabilizing mutation pairs based on interactions observed in known protein 3D structures (Completo, 2020)

JOSÉ RENATO M. S. BARROSO, DIEGO MARIANO, SANDRO R. DIAS, RAFAEL E. O. ROCHA, LUCIANNA H. SANTOS, RONALDO A. P. NAGEM, RAQUEL C. DE MELO-MINARDI
BMC Bioinformatics, v.: 21 2020
Lugar de publicación: United kingdom
E-ISSN: 14712105
DOI: [10.1186/s12859-020-03575-6](https://doi.org/10.1186/s12859-020-03575-6)
<http://dx.doi.org/10.1186/s12859-020-03575-6>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Profiling selectivity of chagasin mutants towards cysteine proteases cruzain or cathepsin L through molecular dynamics simulations (Completo, 2020)

NÚBIA PRATES TOMAN, ANNA SOPHIA KAMENIK, LUCIANNA HELENE SANTOS, FLORIAN HOFER, KLAUS R. LIEDL, RAFAELA SALGADO FERREIRA

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 39 p.:5940 - 5952, 2020

Lugar de publicación: United kingdom

ISSN: 07391102

E-ISSN: 15380254

DOI: [10.1080/07391102.2020.1796797](https://doi.org/10.1080/07391102.2020.1796797)

<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2020.1796797>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Structural insights into NS5B protein of novel equine hepatitis C virus and pegivirus complexed with polymerase inhibitors (Completo, 2020)

PEDRO PEREIRA LIRA FURTADO DE ALBUQUERQUE, LUCIANNA H.S. SANTOS, DEBORAH ANTUNES, ERNESTO RAUL CAFFARENA, ANDREZA SORIANO FIGUEIREDO

Virus Research, v.: 278 p.:197867 2020

Lugar de publicación: Netherlands

ISSN: 01681702

DOI: [10.1016/j.virusres.2020.197867](https://doi.org/10.1016/j.virusres.2020.197867)

<http://dx.doi.org/10.1016/j.virusres.2020.197867>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Insights into the Mechanism of Ethionamide Resistance in Mycobacterium tuberculosis through an in silico Structural Evaluation of EthA and Mutants Identified in Clinical Isolates (Completo, 2020)

VINICIUS CARIUS DE SOUZA, DEBORAH ANTUNES, LUCIANNA H.S. SANTOS, PRISCILA VANESSA ZABALA CAPRILES GOLIATT, ERNESTO RAUL CAFFARENA, ANA CAROLINA RAMOS GUIMARÃES, TECA CALCAGNO GALVÃO

Catalysts, v.: 10 p.:543 2020

Lugar de publicación: Switzerland

E-ISSN: 20734344

DOI: [10.3390/catal10050543](https://doi.org/10.3390/catal10050543)

<http://dx.doi.org/10.3390/catal10050543>

Scopus®

Glutathione S-transferase: a database for improving the rational design of glucose-tolerant α -glucosidases (Completo, 2020)

DIEGO MARIANO, NAIARA PANTUZA, LUCIANNA H. SANTOS, RAFAEL E. O. ROCHA, LEONARDO H. F. DE LIMA, LUCAS BLEICHER, RAQUEL CARDOSO DE MELO-MINARDI

BMC Molecular and Cell Biology, v.: 21 2020

E-ISSN: 26618850

DOI: [10.1186/s12860-020-00293-y](https://doi.org/10.1186/s12860-020-00293-y)

<http://dx.doi.org/10.1186/s12860-020-00293-y>

Scopus®

Antigenic and Substrate Preference Differences between Scorpion and Spider Dermonecrotic Toxins, a Comparative Investigation (Completo, 2020)

RAMLA BEN YEKHLEF, LIZA FELICORI, LUCIANNA HELENE SANTOS, CAMILA F. B. OLIVEIRA, RAOUDHA FADHLOUN, ELHAM TORABI, DELAVAR SHAHBAZZADEH, KAMRAN POOSHANG BAGHERI, RAFAELA SALGADO FERREIRA, LAMIA BORCHANI

Toxins, v.: 12 p.:631 2020

Lugar de publicación: Switzerland

E-ISSN: 20726651

DOI: [10.3390/toxins12100631](https://doi.org/10.3390/toxins12100631)

<http://dx.doi.org/10.3390/toxins12100631>

Scopus®

Benzimidazole inhibitors of the major cysteine protease of *Trypanosoma brucei* (Completo, 2019)

GLAÉCIA AN PEREIRA, LUCIANNA H SANTOS, STEVEN C WANG, LUAN C MARTINS, FILIPE S VILLELA, WEITING LIAO, MARCO A DESSOY, LUIZ C DIAS, ADRIANO D ANDRICOPULO, MARIANA AF COSTA, RONALDO AP NAGEM, CONOR R CAFFREY, KLAUS R LIEDL, ERNESTO R CAFFARENA, RAFAELA S FERREIRA

Future Medicinal Chemistry, v.: 11 p.:1537 - 1551, 2019

Lugar de publicación: United kingdom

ISSN: 17568919

E-ISSN: 17568927

DOI: [10.4155/fmc-2018-0523](https://doi.org/10.4155/fmc-2018-0523)

<http://dx.doi.org/10.4155/fmc-2018-0523>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

A Computational Method to Propose Mutations in Enzymes Based on Structural Signature Variation (SSV) (Completo, 2019)

DIEGO MARIANO , LUCIANNA SANTOS , KARINA MACHADO , ADRIANO WERHLI ,
LEONARDO DE LIMA , RAQUEL DE MELO-MINARDI

International Journal of Molecular Sciences, v.: 20 p.:333 2019

Lugar de publicación: Switzerland

E-ISSN: 14220067

DOI: [10.3390/ijms20020333](https://doi.org/10.3390/ijms20020333)

<http://dx.doi.org/10.3390/ijms20020333>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Introducing Programming Skills for Life Science Students (Completo, 2019)

DIEGO MARIANO , PEDRO MARTINS , LUCIANNA HELENE SANTOS , RAQUEL CARDOSO DE
MELO??MINARDI

Biochemistry and Molecular Biology Education, v.: 47 p.:288 - 295, 2019

Lugar de publicación: United states

ISSN: 14708175

E-ISSN: 15393429

DOI: [10.1002/bmb.21230](https://doi.org/10.1002/bmb.21230)

<http://dx.doi.org/10.1002/bmb.21230>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

nAPOLI: a graph-based strategy to detect and visualize conserved protein-ligand interactions in large-scale (Completo, 2019)

ALEXANDRE VICTOR FASSIO , LUCIANNA H. SANTOS , SABRINA A. SILVEIRA , RAFAELA S.
FERREIRA , RAQUEL CARDOSO DE MELO-MINARDI

IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics, p.:1 - 1, 2019

Lugar de publicación: United states

ISSN: 15455963

E-ISSN: 15579964

DOI: [10.1109/tcbb.2019.2892099](https://doi.org/10.1109/tcbb.2019.2892099)

<http://dx.doi.org/10.1109/tcbb.2019.2892099>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Proteingo: Motivation, user experience, and learning of molecular interactions in biological complexes (Completo, 2019)

MARCOS F.M. SILVA , PEDRO M. MARTINS , DIEGO C.B. MARIANO , LUCIANNA HELENE
SANTOS , ISABELA PASTORINI , NAIARA PANTUZA , CRISTIANE N. NOBRE , RAQUEL C. DE
MELO-MINARDI

Entertainment Computing, v.: 29 p.:31 - 42, 2019

Lugar de publicación: Netherlands

ISSN: 18759521

DOI: [10.1016/j.entcom.2018.11.001](https://doi.org/10.1016/j.entcom.2018.11.001)

<http://dx.doi.org/10.1016/j.entcom.2018.11.001>

Scopus®

Studying effects of different protonation states of His11 and His102 in ribose-5-phosphate isomerase of *Trypanosoma cruzi*: an example of cooperative behavior (Completo, 2019)

RAFAEL F. SOARES , DEBORAH ANTUNES , LUCIANNA H. S. SANTOS , GISELE VIEIRA ROCHA ,
LEONARDO SOARES BASTOS , ANA CAROLINA R. GUIMARÃES , ERNESTO R. CAFFARENA

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 38 p.:2047 - 2056, 2019

Lugar de publicación: United kingdom

ISSN: 07391102

E-ISSN: 15380254

DOI: [10.1080/07391102.2019.1626769](https://doi.org/10.1080/07391102.2019.1626769)

<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2019.1626769>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Thiophenacetamide as a potential modulator to NF-?B: structure and dynamics study using *in silico* and molecular biology assays (Completo, 2018)

VANESSA S. SILVA , FATIMA M. VERGARA , LEONARDO N. SEITO , DEBORAH ANTUNES ,
LUCIANNA H. S. SANTOS , MARIA G. HENRIQUES , ERNESTO R. CAFFARENA
Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 37 p.:4395 - 4406, 2018
Lugar de publicación: United kingdom
ISSN: 07391102
E-ISSN: 15380254
DOI: [10.1080/07391102.2018.1552623](https://doi.org/10.1080/07391102.2018.1552623)
<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2018.1552623>
WEB OF SCIENCE™ Scopus™

Characterization of glucose-tolerant α -glucosidases used in biofuel production under the bioinformatics perspective: a systematic review (Completo, 2017)

D.C.B. MARIANO , C. LEITE , L.H.S. SANTOS , L.F. MARINS , K.S. MACHADO , A.V. WERHLI , L.H.F. LIMA , R.C. DE MELO-MINARDI
Genetics and Molecular Research, v.: 16 2017
Lugar de publicación: Brazil
E-ISSN: 16765680
DOI: [10.4238/gmr16039740](https://doi.org/10.4238/gmr16039740)
<http://dx.doi.org/10.4238/gmr16039740>
WEB OF SCIENCE™ Scopus™ Latindex

Computational drug design strategies applied to the modelling of human immunodeficiency virus-1 reverse transcriptase inhibitors (Completo, 2015)

LUCIANNA HELENE SANTOS , RAFAELA SALGADO FERREIRA , ERNESTO RAÚL CAFFARENA
Memórias do Instituto Oswaldo Cruz, v.: 110 p.:847 - 864, 2015
Lugar de publicación: Brazil
E-ISSN: 00740276
DOI: [10.1590/0074-02760150239](https://doi.org/10.1590/0074-02760150239)
<http://dx.doi.org/10.1590/0074-02760150239>
Scopus™ Latindex

Global and Local Controllability (Completo, 2014)

MARIA HERMINIA DE PAULA LEITE MELLO , LUCIANNA HELENE SILVA DOS SANTOS
Boletim da Sociedade Paranaense de Matemática, v.: 32 p.:27 2014
ISSN: 00378712
E-ISSN: 21751188
DOI: [10.5269/bspm.v32i1.16899](https://doi.org/10.5269/bspm.v32i1.16899)
<http://dx.doi.org/10.5269/bspm.v32i1.16899>
WEB OF SCIENCE™ Scopus™

LIBROS

Computer-Aided Drug Discovery and Design, Computer-Aided and Machine Learning-Driven Drug Design (Participación , 2024) Publicado

DEBORAH ANTUNES , LUCIANNA HELENE SANTOS , ANA CAROLINA RAMOS GUIMARÃES , ERNESTO RAUL CAFFARENA , Computer-Aided Drug Discovery and Design
Editorial: Springer Nature Switzerland , Cham
Tipo de publicación: Otros
Referado
Escrito por invitación
Medio de divulgación: Internet
ISSN/ISBN: 9783031767173
https://doi.org/10.1007/978-3-031-76718-0_10

Capítulos:
Free Energy Perturbation and Free-Energy Calculations Applied to Drug Design
Página inicial 263, Página final 297

Manual de Escrita Científica: Teoria e Prática Aplicadas à Bioinformática (Completo , 2021) Publicado

DIEGO MARIANO , LUCIANNA SANTOS
Edición: 1

Editorial: Alfahelix
Tipo de publicación: Material didáctico
DOI: [10.51780/978-6-599-275319](https://doi.org/10.51780/978-6-599-275319)
Medio de divulgación: Internet
ISSN/ISBN: 9786599275319
<http://dx.doi.org/10.51780/978-6-599-275319>

Receptors P1 and P2 as Targets for Drug Therapy in Humans (Participación , 2020) Publicado

ANAEL V.P. ALBERTO , LUCIANNA H.S. SANTOS , RAFAEL FERREIRA , DINARTE N.M. FERREIRA , LUIZ A. ALVES
Editor/Compilador: Oswaldo Cruz Foundation , Receptors P1 and P2 as Targets for Drug Therapy in
Editorial: IntechOpen
Tipo de publicación: Investigación
DOI: [10.5772/intechopen.86862](https://doi.org/10.5772/intechopen.86862)
Referado
Escrito por invitación
Medio de divulgación: Internet
ISSN/ISBN: 9781789845
<http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.86862>

Capítulos:
A Brief View of Molecular Modeling Approaches to P2 Receptors
Página inicial 2, Página final 19

Advances in Bioinformatics and Computational Biology,Lecture Notes in Computer Science (Participación , 2020) Publicado

DIEGO MARIANO , MÍVIAN FERREIRA , BRUNO L. SOUSA , LUCIANNA H. SANTOS , RAQUEL C. DE MELO-MINARDI
Editor/Compilador: 13th Brazilian Symposium on Bioinformatics , Advances in Bioinformatics and Computational Biolo
Editorial: Springer International Publishing , Cham
Tipo de publicación: Investigación
DOI: [10.1007/978-3-030-65775-8_22](https://doi.org/10.1007/978-3-030-65775-8_22)
Referado
Medio de divulgación: Internet
ISSN/ISBN: 9783030657741
http://dx.doi.org/10.1007/978-3-030-65775-8_22

Capítulos:
A Brief History of Bioinformatics Told by Data Visualization
Página inicial 235, Página final 246

Methods in Molecular Biology,Docking Screens for Drug Discovery (Participación , 2019) Publicado

Trabajo relevante
LUCIANNA H. S. SANTOS , RAFAELA S. FERREIRA , ERNESTO R. CAFFARENA
Editor/Compilador: Walter Filgueira de Azevedo Jr. , Methods in Molecular Biology
Editorial: Springer New York , New York, NY
Tipo de publicación: Investigación
DOI: [10.1007/978-1-4939-9752-7_2](https://doi.org/10.1007/978-1-4939-9752-7_2)
Referado
Escrito por invitación
Medio de divulgación: Internet
ISSN/ISBN: 9781493997510
http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4939-9752-7_2

Capítulos:
Integrating Molecular Docking and Molecular Dynamics Simulations
Página inicial 13, Página final 34

OTRAS PRODUCCIONES

CURSOS DE CORTA DURACIÓN DICTADOS

Docking Molecular (2020)

Lucianna Helene Silva Santos
Extensión extracurricular
País: Brasil
Idioma: Portugués

Tópicos em Bioinformática II - Software R para modelagem molecular (2019)

Lucianna Helene Silva Santos
Otro
País: Brasil
Idioma: Portugués
Tipo de participación: Docente

Tópicos em Bioinformática II - Software R para modelagem molecular (2018)

Lucianna Helene Silva Santos
Otro
País: Brasil
Idioma: Portugués

Tópicos Especiais em Ciência da Computação - Práticas em docking molecular e virtual screening (2017)

Lucianna Helene Silva Santos
Otro
País: Brasil
Idioma: Portugués

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

POSGRADO

Caracterização estrutural de subtipos de cruzipaína por modelagem molecular (2020 - 2023)

Tesis de maestria
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Federal de Minas Gerais , Brasil
Programa: Pós-graduação em Bioquímica e Imunologia.
Tipo de orientación: Cotutor (Lucianna Helene Silva Santos)
Nombre del orientado: Augusto César Broilo Campos
País: Brasil

Análise in silico da ligação do sítio polibásico de sars-cov-2 a serina proteases relacionadas a furina através de docagem e dinâmica molecular, indicando contatos possivelmente relevantes (2020 - 2022)

Tesis de maestria
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Federal de Minas Gerais , Brasil
Programa: Programa de Pós-Graduação em Bioinformática
Tipo de orientación: Cotutor (Lucianna Helene Silva Santos)
Nombre del orientado: Arthur Pereira da Fonseca
País: Brasil

Domínio HIRAN: variações estruturais e suas implicações na interação com ssDNA (2018 - 2020)

Tesis de maestria
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Federal de Minas Gerais , Brasil
Programa: Programa de Pós-Graduação em Bioinformática
Tipo de orientación: Cotutor (Lucianna Helene Silva Santos)
Nombre del orientado: Bruno Marques Silva
País: Brasil

A new method for ligand-based virtual screening using linear algebra. (2016 - 2020)

Tesis de doctorado

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Federal de Minas Gerais , Brasil

Programa: Programa de Pós-Graduação em Bioinformática

Tipo de orientación: Cotutor (Lucianna Helene Silva Santos)

Nombre del orientado: Carmelina Figueiredo Vieira Leite

País: Brasil

GRADO

ToxAnalyzer: Uma Ferramenta para Análise de Dados em Toxicogênica e Toxicologia Computacional (2015 - 2019)

Tesis/Monografía de grado

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Federal de Minas Gerais , Brasil

Programa: Faculdade de Farmacia

Tipo de orientación: Cotutor (Lucianna Helene Silva Santos)

Nombre del orientado: Daniel Ribeiro Rodrigues

País: Brasil

TUTORÍAS PASAJE A DOCTORADO

POSGRADO

Optimización del campo de fuerza de grano grueso SIRAH para la correcta reproducción de temperaturas de melting de proteínas (2023 - 2025)

Tesis de maestria

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias , Uruguay

Programa: Posgrado en Química

Tipo de orientación: Cotutor (Lucianna Helene Silva Santos , PANTANO S)

Nombre del orientado: María Antonella Alba López

País: Uruguay

Otros datos relevantes

PRESENTACIONES EN EVENTOS

XLVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2025)

Congreso

Investigating the impact of genomic configurations on the Porcine Circovirus (PCV2) capsid via CG MD

Colombia

Tipo de participación: Expositor oral

II CONESUL Symposium on Biomolecular Simulation (2024)

Encuentro

Exploring PCV2d virus-like particle stability through coarse-grained molecular dynamics simulations

Argentina

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: University of Buenos Aires

Conesul Symposium on Biomolecular Simulation (2023)

Encuentro

Coarse-grained simulations of a virus like particle with the SIRAH force field

Brasil

Tipo de participación: Expositor oral

34o Congresso Brasileiro de Virologia (2023)

Congreso

MOLECULAR SIMULATIONS FOR VIROLOGY: UTILIZING THE SIRAH FORCE FIELD TO VIRUS-LIKE PARTICLES DYNAMICS

Brasil

Tipo de participación: Poster

L Annual Meeting of the Argentinean Biophysical Society (2022)

Encuentro

he intermediate state structure of the UreA transporter from a blend of Artificial and Biological intelligence. Shaken, not stirred.

Argentina

Tipo de participación: Expositor oral

Indicadores de producción

ACTIVIDADES	7
Líneas de investigación	4
Proyectos Investigación Desarrollo	3
PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	46
Artículos publicados en revistas científicas	41
Completo	40
Reseña	1
Libros y Capítulos	5
Libro publicado	1
Capítulos de libro publicado	4
Otros tipos	4
PRODUCCIÓN TÉCNICA	4
FORMACIÓN RRHH	6
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	5
Tesis de maestría	3
Tesis de doctorado	1
Tesis/Monografía de grado	1
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones con pasaje a doctorado	1
Tesis de maestría	1