

**Relatório atividades dos últimos dois anos
(Professora SENIOR/IQUSP)**

**Período de 26/05/2022 a 26 de maio de 2024)
Antonia Tavares do Amaral**

1. Fontes de financiamentos (todas as entidades e empresas públicas e privadas - inclusive as de FAPESP).

Entidade/Empresa: FAPESP (Sou Pesquisadora Associada)

-Título do Projeto: CEPID *Redox Processes in biomedicine* – Redoxoma. FAPESP;.

Coordenadora: Prof Ohara Augusto. (Departamento da Bioquímica/QBQ)

- Número de Processo 2013/07937-8 (está sendo renovado//atualizado)

-Período de Vigência (atual): 01/06/2013 a 31/08/2024. 01/09/2013 a 31/08/2025

- Valor: **Consumo Nacional = 30.379,49**

Reserva Técnica = 11.677,28

Consumo Importado = US\$ 17.917,88

-Período de Vigência: 01/06/2013 a 31/08/2024. 01/09/2013 a 31/08/2025

2. Bolsas de todos os alunos orientados (IC/Ms/PhD/PD) - inclusive as de FAPESP.

1. Nome: Lucas Gasparello Viviani (Sou colaboradora)

sobre a supervisão da Profa Assoc Sayuri Miyamoto (Depto de Bioquímica, IQUSP, SP). Curso: (IC/Ms/PhD/PD) **PD**

Agência de fomento: FAPESP

Número do processo: 2021/10514-8

Título do projeto (em inglês) *Identification and selection of inhibitors and/or activators of enzymes involved in the formation and detoxification of oxidized lipids*: Identificação e seleção de inibidores e/ou ativadores de enzimas envolvidas na formação e na detoxificação de lipídeos oxidados//):

Período de vigência da bolsa: **01/10/2021 a 30/09/2023.... (solicitação de prorrogação até 31/08/24 e vai ser submetida)**

Valor mensal da bolsa: **R\$ 9.047,40**

Valor anual da reserva técnica ou taxa de bancada (se houver): **R\$ 21.075,10** (incluindo os reajustes)

Manuscrito publicado :Viviani, L.G.; Kokh, D.B.; Wade, R.C.; Amaral, A.T.-do. Molecular Dynamics Simulations of the Human Ecto-5'-Nucleotidase (h-ecto-5'-NT, CD73): Insights into Protein Flexibility and Binding Site Dynamics. *J. Chem. Inf. Model.*, 2023 (ASAP).

DOI: 10.1021/acs.jcim.3c01068

2. Nome: Prof Assoc. Ricardo José Giordano (Depto de Bioquímica, IQUSP, SP)/ Tenho **Colaboração. Iremos indicar bolsista)**

Curso: (IC/Ms/PhD/PD)**PD** Agência de fomento: FAPESP

Número do processo: **Proc FAPESP 2019/25828-8.**

2019/25828-8 - Projeto de Pesquisa – Temático (concedido)

Título do projeto (em inglês): “Busca virtual de novos inibidores da angiogênese patológica” *Virtual screening of novel pathological angiogenesis inhibitors*

Período de vigência da bolsa: **31/06/2022 -31/05/2027**

Valor mensal da bolsa: **Iremos indicar Bolsista**

Valor anual da reserva técnica ou taxa de bancada

2019/25828-8 - Projeto de Pesquisa – Temático (concedido)–01/06/2022 a 31/05/2027

3. Alunos que concluíram/ “trancaram” a orientação entre mm/aaaa e mm/aaaa. Informar: Não tenho

Nome:

Curso: (IC/Ms/PhD/PD)

Mês/ano de conclusão:

4.. Bolsa de produtividade CNPq (caso haja). Informar:

Nível: **Não tenho**

Valor:

Período: mm/aaaa até mm/aaaa

5. Nome de todos os funcionários que trabalham no laboratório e, caso algum funcionário trabalhe em período parcial, informar quantidade de horas/semana trabalhada. Leandro de Rezende(40hs/semana)

6. Lista de colaboradores internacionais/ FORA DA USP/(Brasil) e no exterior

6.1. Colaboração com Prof. Rebecca Wade (Heidelberg Institute for Theoretical Studies, HITS, Heidelberg, Alemanha):

Período :03/09/2018 - a Julho 2024

Título do projeto Molecular dynamics simulations of the human ecto-5'-nucleotidase (ecto-5'-NT, CD73): insights into protein flexibility and binding site dynamics.

Consequences: **Manuscrito publicado e outros em elaboração**

Viviani, L.G.; Kokh, D.B.; Wade, R.C.; Amaral, A.T.-do. Molecular Dynamics Simulations of the Human Ecto-5'-Nucleotidase (h-ecto-5'-NT, CD73): Insights into Protein Flexibility and Binding Site Dynamics. *J. Chem. Inf. Model.*, 2023 (ASAP).

DOI: 10.1021/acs.jcim.3c01068

6.2 Colaboração com Prof. Thierry Langer, Austria):

Período :03/09/2018 -- a Jul/2023 -Julho 2024

Título do projeto Partner, Inte:Ligand Software Development & Consulting
Prof. Thierry Langer,

2344 Maria Enzersdorf, C. M. Hofbauer-Gasse 6, Austria

3. FORA DA USP (BRASIL) (Sou colaboradora)

6.3, Colaboração com **Prof. Luiz Anastácio Alves** (FIOCRUZ, Rio de Janeiro, Brasil): **março de 2022 a Jul/2024**

Título do projeto Busca virtual (*Virtual screening, VS*) de antagonistas do receptor P2X7.

Consequences: **Manuscrito submetido (*em fase final elaboração*)**

Combining shape-based and docking approaches for selecting P2X7 antagonist candidates from natural product libraries Natiele Carla da Silva Ferreira^{1,†}, Lucas Gasparello Viviani^{2,†}, Lauro Miranda Lima¹, Antonia Tavares do Amaral², João Victor Paiva Romano¹, Anderson Lage Fortunato¹, Rafael Ferreira Soares³, Anael Viana Pinto Alberto¹, Jose Aguiar Coelho Neto^{4,5}, Luiz Anastacio Alves^{1,*}

Atenciosamente

São Paulo, 03 de abril de 2024



Prof Assoc III Antonia Tavares do Amaral

Antonia Tavares do Amaral

(Numero. USP: 2917420)