



## Laurent Emmanuel Dardenne

**Bolsista de Produtividade em Pesquisa do CNPq - Nível 2**

Endereço para acessar este CV: <http://lattes.cnpq.br/8344194525615133>

Última atualização do currículo em 21/12/2013

Possui graduação em Física pela Universidade de Brasília (1992), mestrado em Física pela Universidade de Brasília (1995) e doutorado em Ciências Biológicas (Biofísica) pelo Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho da Universidade Federal do Rio de Janeiro (2000). Atualmente é pesquisador do Laboratório Nacional de Computação Científica. Tem experiência na área de Biofísica, com ênfase em Modelagem Molecular, atuando principalmente nos seguintes temas: desenvolvimento de metodologias de docking e predição ab initio de estruturas de proteínas, drug design, dinâmica molecular, algoritmos genéticos e cálculos quânticos de estrutura eletrônica. **(Texto informado pelo autor)**

### Identificação

<b>Nome</b>	Laurent Emmanuel Dardenne
<b>Nome em citações bibliográficas</b>	DARDENNE, L. E.;Dardenne, Laurent E;Dardenne, Laurent Emmanuel;Dardenne, L.E.;Soares, Rosemberg O.

### Endereço

<b>Endereço Profissional</b>	Laboratório Nacional de Computação Científica, Pós Graduação, Departamento de Mecânica Computacional. Avenida Getúlio Vargas 333 Quitandinha 25651070 - Petrópolis, RJ - Brasil Telefone: (24) 22336009 Ramal: 6009 Fax: (24) 22336167 URL da Homepage: <a href="http://www.gmmsb.lncc.br">http://www.gmmsb.lncc.br</a>
------------------------------	--

## Formação acadêmica/titulação

---

2000 - 2001	<p>Pós-Doutorado. Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas Faculdade de Fa. Grande área: Ciências Biológicas / Área: Farmacologia / Subárea: Farmacologia Bioquímica e Molecular / Especialidade: Desenho Racional de Compostos Protótipos Fármacos. Grande Área: Ciências Biológicas / Área: Farmacologia / Subárea: Farmacologia Bioquímica e Molecular / Especialidade: Modelagem Molecular. Grande Área: Ciências Biológicas / Área: Farmacologia / Subárea: Farmacologia Bioquímica e Molecular / Especialidade: Desenvolvimento Metodológico.</p>
1995 - 2000	<p>Doutorado em Ciências Biológicas (Biofísica) (Conceito CAPES 7). Universidade Federal do Rio de Janeiro, UFRJ, Brasil. Título: Propriedades Eletrostáticas do Sítio Ativo de Cisteíno Proteinases da Família da Papaína, Ano de obtenção: 2000. Orientador:  Paulo Mascarello Bisch. Bolsista do(a): Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, Brasil. Palavras-chave: Propriedades Eletrostáticas; Cisteíno Proteinases; Calculos ab initio; Expansões Multipolares Multicentradas; Catálise Enzimática; Papaína. Grande área: Ciências Biológicas / Área: Biofísica / Subárea: Biofísica Molecular / Especialidade: Modelagem Molecular. Grande Área: Ciências Biológicas / Área: Biofísica / Subárea: Biofísica Molecular. Grande Área: Ciências Biológicas / Área: Biofísica / Subárea: Biofísica Molecular / Especialidade: Reações Enzimáticas. Setores de atividade: Produtos e Processos Biotecnológicos.</p>
1992 - 1995	<p>Mestrado em Física (Conceito CAPES 5). Universidade de Brasília, UNB, Brasil. Título: Estudo de Instabilidades e Problemas de Convergência de Soluções Hartree-Fock, Ano de Obtenção: 1995. Orientador:  Nilo Makiuchi. Bolsista do(a): Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, Brasil. Palavras-chave: Instabilidades; Multiplicidade; Soluções Hartree-Fock; Método Algébrico. Grande área: Ciências Exatas e da Terra / Área: Física / Subárea: Física Atômica e Molecular / Especialidade: Estrutura Eletrônica de Átomos e Moléculas; Teoria. Setores de atividade: Produtos e Processos Biotecnológicos.</p>
1986 - 1992	<p>Graduação em Física. Universidade de Brasília, UNB, Brasil. Bolsista do(a): Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, Brasil.</p>

## Formação Complementar

---

1997 - 1997	<p>Exploitation de Sequences de Proteines. (Carga horária: 80h). Centre National de la Recherche Scientifique.</p>
-------------	--

## Atuação Profissional

---

### Laboratório Nacional de Computação Científica, LNCC, Brasil.

#### Vínculo institucional

2002 - Atual

Vínculo: Servidor Público, Enquadramento Funcional: Tecnologista, Carga horária: 40, Regime: Dedicção exclusiva.

#### Vínculo institucional

2000 - 2002

Vínculo: Professor Visitante, Enquadramento Funcional: , Carga horária: 0, Regime: Dedicção exclusiva.

#### Outras informações

Bolsista DTI (Desenvolvimento tecnológico e Industrial) - nível 7B - CNPq/MCT

#### Atividades

05/2009 - Atual

Direção e administração, LNCC, .

Cargo ou função

Coordenador do Programa de Capacitação Institucional do LNCC.

04/2009 - Atual

Direção e administração, Coordenação de Mecânica Computacional, .

Cargo ou função

Chefe de Departamento.

10/2000 - Atual

Pesquisa e desenvolvimento , Pós Graduação, Departamento de Mecânica Computacional.

Linhas de pesquisa

Desenvolvimento de Metodologias de DOCKING visando o Desenho Racional de Compostos Bioativos

Desenvolvimento de Metodologias para o Cálculo de Propriedades Eletrostáticas de Proteínas

Modelagem Computacional de Macromoléculas Biológicas

07/2008 - 03/2009

Direção e administração, Coordenação de Mecânica Computacional, .

Cargo ou função

Vice-chefe.

6/2006 - 9/2006

Ensino, Modelagem Computacional, Nível: Pós-Graduação

Disciplinas ministradas

Estruturas de Proteínas e Simulação Computacional de Macromoléculas Biológicas

1/2006 - 2/2006

Ensino, Nivelamento em Modelagem Computacional, Nível: Aperfeiçoamento

Disciplinas ministradas

Introdução a Biologia Molecular e Bioquímica

6/2005 - 9/2005

Ensino, Modelagem Computacional, Nível: Pós-Graduação

Disciplinas ministradas

Estrutura de Proteínas e Modelagem Computacional de Macromoléculas Biológicas

6/2004 - 9/2004

Ensino, Modelagem Computacional, Nível: Pós-Graduação

Disciplinas ministradas

Estrutura de Proteínas e Modelagem Computacional de Macromoléculas Biológicas

9/2002 - 12/2002

Ensino, Modelagem Computacional, Nível: Pós-Graduação

Disciplinas ministradas

Estrutura de Proteínas e Simulação Computacional de Macromoléculas Biológicas - GB185

9/2001 - 12/2001

Ensino, Modelagem Computacional, Nível: Pós-Graduação

Disciplinas ministradas

Estrutura de Proteínas e Simulação Computacional de Macromoléculas Biológicas - GB185

## Linhas de pesquisa

---

1. Desenvolvimento de Metodologias de DOCKING visando o Desenho Racional de Compostos Bioativos
2. Desenvolvimento de Metodologias para o Cálculo de Propriedades Eletrostáticas de Proteínas
3. Modelagem Computacional de Macromoléculas Biológicas

## Projetos de pesquisa

### 2009 - Atual

Predição de Estruturas de Proteínas e de Complexos Receptor-Ligante:  
Desenvolvimento de Métodos, Algoritmos e Programas

Descrição: Os objetivos científicos deste projeto estão associados com o desenvolvimento de metodologias computacionais em áreas atualmente consideradas estratégicas da biologia molecular computacional. Mais especificamente, visa o desenvolvimento e o aprimoramento das seguintes metodologias e programas baseados em um algoritmo genético específico para encontrar múltiplas conformações de baixa energia: (i) programa para predição de estruturas de proteínas por primeiros princípios utilizando um campo de força molecular clássico, bibliotecas de fragmentos e distintas funções empíricas para incluir o termo de solvatação; (ii) predição de estruturas de proteínas utilizando dados experimentais advindos de experimentos de ressonância magnética nuclear; (iii) programa de docking receptor-ligante incluindo a flexibilidade do receptor, utilizando um campo de força molecular específico para pequenas moléculas ligantes e com uma função empírica de energia livre de ligação baseado em uma metodologia de reconhecimento de padrões. O objetivo é contribuir, tanto através da ampliação da capacidade preditiva destes programas através da incorporação e testes de novas abordagens metodológicas, quanto do ponto de vista computacional ao otimizá-las e adaptá-las para uma plataforma computacional de alto desempenho (máquinas multi-cores e clusters). É também objetivo deste projeto procurar contribuir para a comunidade acadêmica nacional através da disponibilização dos programas desenvolvidos e através da formação de recursos humanos de alto nível na área de desenvolvimento metodológico em modelagem molecular. .

Situação: Em andamento; Natureza: Pesquisa.

Integrantes: Laurent Emmanuel Dardenne - Coordenador.

Financiador(es): Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ - Bolsa.

### 2005 - 2008

Inovação e Desenvolvimento de Fármacos e Medicamentos (Instituto do Milênio)

Descrição: Lider do Projeto: Prof. Eliezer J. Barreiro (Fac. de Farmacia - UFRJ) Este projeto pretende agregar competências acadêmico-científicas do País (cerca de 25 Instituições), através a participação dos pesquisadores seniores, produtivos, e colaboradores, nas diversas áreas e sub-áreas da cadeia do fármaco/medicamento, desde a identificação/validação de novos alvos-terapêuticos empregando técnicas clássicas e inovadoras, experimentais e teóricas, passando por aquelas necessárias a obtenção/síntese de quantidades adequadas à formulação dos novos medicamentos, atingindo a etapa de ensaios pré-clínicos e clínicos de fase 1, de novas moléculas candidatas a protótipos de fármacos. Incluir nesta trajetória novas moléculas patenteadas que sejam promissoras face a resultados já disponíveis, bem como proteger aquelas por ventura descobertas com nível de originalidade inventiva que motive sua proteção. Ademais, pretende-se ainda dentre os objetivos suplementares do Instituto, estudar, identificar e desenvolver rotinas de síntese total, partindo de intermediários de menor custo possível, de fármacos de comprovado interesse terapêutico com patentes vencidas, que representem candidatos a futuros fármacos genéricos. Complementarmente, pretende-se associar a expertise acadêmico-científica dos grupos de pesquisa envolvidos, compondo as diversas etapas da cadeia do fármaco, com participantes do setor farmoquímico e farmacêutico nacional visando o desenvolvimento de novo produto farmacêutico com diferentes níveis de inovação, contribuindo para sanar eventuais lacunas históricas na cadeia produtiva do medicamento no Brasil..

Situação: Concluído; Natureza: Pesquisa.

Alunos envolvidos: Graduação: (0) / Especialização: (0) / Mestrado acadêmico: (3) / Mestrado profissionalizante: (0) / Doutorado: (3) .

Integrantes: Laurent Emmanuel Dardenne - Coordenador.

Financiador(es): Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - Auxílio financeiro.

### 2004 - 2009

Desenvolvimento de Métodos Computacionais Aplicados ao Desenho Racional de Fármacos e Predição de Estrutura de Proteínas

Descrição: Lider do Projeto: Prof. Laurent Emmanuel Dardenne Este projeto tem como objetivo o desenvolvimento de metodologias computacionais e algoritmos na área de modelagem molecular nas seguintes linhas de pesquisa: (I) Descrever e quantificar o modo de interação entre uma proteína e uma molécula ligante;

(II) Predição de estruturas tridimensionais de proteínas; (III) Cálculo de propriedades eletrostáticas de proteínas; Dentre os objetivos específicos deste projeto estão: (1) Desenvolvimento de metodologias de "docking" utilizando o algoritmo "Generalized simulated annealing" e variantes de algoritmos genéticos, orientados para encontrar múltiplas soluções, que possam ser robustos e precisos e que incorporem diferentes níveis de sofisticação com relação aos seguintes tópicos: flexibilidade do receptor e do ligante; inclusão ou não de moléculas de água dentro do sítio ativo; forma de avaliação da energia de interação receptor/ligante; (2) Desenvolvimento e testes de diversas variantes de algoritmos genéticos para a predição de estruturas de proteínas, dentro do modelo HP (Hidrofóbico-Polar), visando a posterior aplicação dos mesmos em modelos de proteínas mais sofisticados; (3) Cálculo de propriedades eletrostáticas de proteínas utilizando a metodologia de expansões multipolares multicentradas derivadas de cálculos quânticos de estrutura eletrônica. .  
 Situação: Concluído; Natureza: Pesquisa.  
 Alunos envolvidos: Graduação: (0) / Especialização: (0) / Mestrado acadêmico: (3) / Mestrado profissionalizante: (0) / Doutorado: (3) .

2002 - 2005

Integrantes: Laurent Emmanuel Dardenne - Coordenador.  
 Financiador(es): Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ - Auxílio financeiro.

Desenvolvimento de Metodologias de Docking Acopladas à Computação de Alto Desempenho Visando o desenho racional de Compostos Bioativos

Descrição: Este projeto tem os seguintes objetivos: (1) Desenvolvimento de metodologias de docking (tendo como base os algoritmos de otimização estocástica Generalized Simulated Annealing e Algoritmo Genético e também algoritmos modificados de Dinâmica Molecular) que possam ser robustos, rápidos e precisos e que incorporem diferentes níveis de sofisticação com relação à flexibilidade do receptor e do ligante, à inclusão ou não de moléculas de água dentro do sítio ativo e também à forma de avaliação da energia de interação receptor/ligante; (2) Construção de uma biblioteca in silico de compostos candidatos a fármacos e de um banco in silico de alvos moleculares orientado para estudos de docking;. (3) Implementação das metodologias desenvolvidas em um ambiente de computação paralela baseado em cluster de PCs; (4) Validação experimental dos resultados computacionais e em caso positivo a realização da síntese de novos compostos e respectivos testes farmacológicos tendo como referência os resultados in silico. Atualmente o Brasil está bastante avançado na área genômica, investindo consideravelmente em projetos de seqüenciamento de genomas completos. Muitos destes projetos visam o descobrimento de alvos moleculares que possam ser utilizados no desenvolvimento de terapias contra doenças tropicais que afetam milhões de pessoas no Brasil e no mundo. A implementação de um projeto na área de desenho racional de fármacos, que integre desenvolvimento metodológico próprio, computação de alto desempenho em conjunto com a parte experimental da química medicinal possui uma importância estratégica bastante relevante em uma área de grande impacto científico e tecnológico no decorrer dos próximos anos. .  
 Situação: Concluído; Natureza: Pesquisa.  
 Alunos envolvidos: Graduação: (0) / Especialização: (0) / Mestrado acadêmico: (0) / Mestrado profissionalizante: (0) / Doutorado: (2) .

2002 - 2005

Integrantes: Laurent Emmanuel Dardenne - Integrante / Araken dos santos Werneck - Integrante / Paulo Mascarello Bisch - Integrante / Pedro gerald Pascutti - Integrante / Shaila Cíntia Sykora Rossle - Integrante / Ernesto Raul Caffarena - Integrante / Luiz Bevilacqua - Coordenador / Camila Silva de Magalhães - Integrante / Alcino Dall'Igna Júnior - Integrante / Renato Simões Silva - Integrante / Hélio José Correa Barbosa - Integrante / Fernanda Maria Pereira Raupp - Integrante / Carlos Cristiano - Integrante / Ricardo Amorim Abreu - Integrante / Alan Wilter da Silva - Integrante / Mônica da Luz Carvalho - Integrante / Diego Henry Barreto Gomes - Integrante / Eliezer de Jesus Barreiro - Integrante / Carlos Alberto Manssour Fraga - Integrante / Ana Luisa P. de Miranda - Integrante / Carlos Maurício R. de Sant'anna - Integrante / Hugo Verli - Integrante / Cláudio Struchiner - Integrante / Kléber Carlos Mundim - Integrante / Lídia Moreira Lima - Integrante.  
 Financiador(es): Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ - Auxílio financeiro / Instituto Virtual de Bioinformática e Modelagem de Biosistemas - Outra.

Desenvolvimento de Modelos QSAR-3D Acoplados a Métodos de Docking Visando o Desenho Racional de Protótipos de Fármacos

Descrição: O objetivo principal deste projeto é a aplicação de metodologias de simulação computacional visando a obtenção de modelos de QSAR-3D que auxiliem no planejamento racional de compostos bioativos, visando a obtenção de novos protótipos de fármacos. Este projeto se coloca dentro de uma perspectiva interdisciplinar onde métodos de modelagem molecular, como a utilização de programas docking e de técnicas de QSAR (2D/3D), serão aplicados no planejamento de novos candidatos a compostos protótipos, os quais serão posteriormente sintetizados e avaliados nos alvos terapêuticos específicos. Esta abordagem caracteriza-se por uma integração de diferentes áreas do conhecimento como química computacional, química orgânica medicinal e farmacologia. Este projeto envolve a colaboração entre pesquisadores com experiência comprovada em áreas-chaves do conhecimento e ligados a importantes instituições de pesquisa do estado do Rio de Janeiro (Laboratório Nacional de Computação Científica - LNCC/Petrópolis; Laboratório de Física Biológica - Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho/IBCCF/UFRJ; Departamento de Química, UFRJ; Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas - LASSBio/Faculdade Farmácia/UFRJ, Departamento de Farmacologia Básica e Clínica do Instituto de Ciências Biomédicas/UFRJ e o Departamento de Química/UFRJ).

Situação: Concluído; Natureza: Pesquisa.

Alunos envolvidos: Graduação: (0) / Especialização: (0) / Mestrado acadêmico: (1) / Mestrado profissionalizante: (0) / Doutorado: (0) .

Integrantes: Laurent Emmanuel Dardenne - Integrante / Paulo Mascarello Bisch - Integrante / Pedro geraldo Pascutti - Integrante / Luiz Bevilacqua - Integrante / Eliezer de Jesus Barreiro - Coordenador / Carlos Alberto Manssour Fraga - Integrante / Ana Luisa P. de Miranda - Integrante / Carlos Maurício Rabello de Sant'anna - Integrante / Lídia Moreira Lima - Integrante.

Financiador(es): Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - Auxílio financeiro.

## Projetos de desenvolvimento

2004 - 2005

Projeto BIOPAUÁ

Descrição: O objetivo do Portal BioPAUÁ consiste na disponibilização de um ambiente Web para facilitar o desenvolvimento de pesquisas na área de Dinâmica Molecular, em particular, aplicações para investigar complexos proteína/ligantes por meio de uma plataforma de grade computacional. Foi nosso desejo introduzir as técnicas de DM, por meio do programa GROMACS, de uma forma mais amigável e eficiente, utilizando a infra-estrutura de grade computacional do Projeto PAUÁ, baseado no middleware de Grade Computacional OURGRID, numa rede espalhada pelo Brasil, do Nordeste ao Sul, a partir do LNCC/MCT, numa colaboração do IBCCF/UFRJ (Laboratório de Modelagem e Dinâmica Molecular) e apoio da HP do Brasil P&D. O Portal oferece o serviço de submissão de jobs, cujas simulações poderão ser feitas utilizando-se apenas um arquivo do tipo PDB como entrada, ou a partir de um arquivo tipo TPR, para usuários já experientes no GROMACS.

Situação: Concluído; Natureza: Desenvolvimento.

Alunos envolvidos: Graduação: (0) / Especialização: (0) / Mestrado acadêmico: (0) / Mestrado profissionalizante: (0) / Doutorado: (0) .

Integrantes: Laurent Emmanuel Dardenne - Coordenador.

Financiador(es): Hewlett-Packard Brasil - Matriz - Auxílio financeiro.

## Revisor de periódico

2008 - Atual

Periódico: Anais da Academia Brasileira de Ciências

2011 - Atual

Periódico: Química Nova (Impresso)

2012 - Atual

Periódico: Journal of the Brazilian Chemical Society (Impresso)

## Áreas de atuação

1. Grande área: Ciências Biológicas / Área: Biofísica / Subárea: Biofísica Molecular/Especialidade: Modelagem Molecular.
2. Grande área: Ciências Biológicas / Área: Farmacologia / Subárea: Farmacologia Bioquímica e Molecular/Especialidade: Desenho Racional de Compostos Protótipos Fármacos.
3. Grande área: Ciências Biológicas / Área: Bioquímica / Subárea: Química de Macromoléculas/Especialidade: Propriedades Eletrostáticas de Proteínas.
4. Grande área: Ciências Exatas e da Terra / Área: Física / Subárea: Física Atômica e Molecular/Especialidade: Estrutura Eletrônica de Átomos e Moléculas; Teoria.
5. Grande área: Ciências Biológicas / Área: Biofísica / Subárea: Biologia Computacional/Especialidade: Biofísica Molecular.
6. Grande área: Ciências Biológicas / Área: Biofísica / Subárea: Biologia Computacional/Especialidade: Predição ab initio de estruturas de proteínas.

## Idiomas

Português	Compreende Bem, Fala Bem, Lê Bem, Escreve Bem.
Francês	Compreende Bem, Fala Bem, Lê Bem, Escreve Razoavelmente.
Inglês	Compreende Bem, Fala Razoavelmente, Lê Bem, Escreve Razoavelmente.


## Prêmios e títulos

2009	Pesquisador Cientista Jovem do Nosso Estado, FAPERJ.
2008	Melhor poster BRAZMEDCHEM2008 - sessão Drug Design: Tools in Cheminformatics and Bioinformatics, Divisão de Química Medicinal da SBQ.

## Produções

### Produção bibliográfica

### Citações


Web of Science 	
Total de trabalhos:18	
Total de citações:94	Fator H:6
DARDENNE LE Data: 03/12/2013	

SCOPUS	
Total de trabalhos:17	
Total de citações:119	
dardenne, l. e. e werneck, a. s. Data: 03/12/2013	

### Artigos completos publicados em periódicos

Ordenar por

Ordem Cronológica

1.  CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, HELIO J.C. ; **Dardenne, Laurent Emmanuel** . A Multiple Minima Genetic Algorithm for Protein Structure Prediction. Applied Soft Computing (Print) **JCR**, v. 15, p. 88-99, 2013.
2. Guedes, I.A. ; DE MAGALHAES, C S ; **Dardenne, L.E.** . Recepto-ligand molecular docking. Biophysical Reviews, v. 1, p. 1-14, 2013.

3. Belarmino, L.C. ; Capriles, P.V.S.Z. ; Crovella, S. ; **Dardenne, L.E.** ; Benko-Iseppon, A.M. . EST-Database Search of Plant Defensins - An Example Using Sugarcane, a Large and Complex Genome. *Current Protein and Peptide Science JCR*, v. 11, p. 248-254, 2010.  
Citações: **WEB OF SCIENCE**™ 2 | **SCOPUS** 2
4. SILVA, João Hermínio Martins da ; **Dardenne, Laurent Emmanuel** ; SAVINO, Wilson ; CAFFARENA, Ernesto Raul . Analysis of integrin specific antagonists binding modes: structural insights by molecular docking, molecular dynamics and linear interaction energy method for free energy calculations. *Journal of the Brazilian Chemical Society (Impresso) JCR*, v. 21, p. 546-555, 2010.  
Citações: **WEB OF SCIENCE**™ 1 | **SCOPUS** 1
5. Soares, Rosemberg O. ; Batista, Paulo R. ; Costa, Mauricio G.S. ; Dardenne, Laurent E. ; Pascutti, Pedro G. ; Soares, Marcelo A. . Understanding the HIV-1 protease nelfinavir resistance mutation D30N in subtypes B and C through molecular dynamics simulations. *Journal of Molecular Graphics & Modelling JCR*, p. 137-147, 2010.  
Citações: **WEB OF SCIENCE**™ 5 | **SCOPUS** 7
6. ★ Capriles, Priscila VSZ ; Guimaraes, Ana CR ; Otto, Thomas D ; Miranda, Antonio B ; **Dardenne, Laurent E** ; Degrave, Wim M . Structural Modelling and Comparative Analysis of Homologous, Analogous and Specific Proteins from *Trypanosoma cruzi* versus *Homo sapiens*: Putative Drug Targets for Chagas' Disease Treatment. *BMC Genomics JCR*, v. 11, p. 610, 2010.  
Citações: **WEB OF SCIENCE**™ 1 | **SCOPUS** 4
7. Alves-Ferreira, Marcelo ; Guimarães, Ana Carolina Ramos ; CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; **DARDENNE, L. E.** ; Degrave, Wim M . A new approach for potential drug target discovery through in silico metabolic pathway analysis using *Trypanosoma cruzi* genome information. *Memórias do Instituto Oswaldo Cruz (Impresso) JCR*, v. 104, p. 1100-1110, 2009.  
Citações: **WEB OF SCIENCE**™ 6 | **SciELO** 1 | **SCOPUS** 6
8. WERNECK, A. S. ; R FILHO, Tarcísio M ; **DARDENNE, L. E.** . General Methodology to Optimize Damping Functions to Account for Charge Penetration Effects in Electrostatic Calculations Using Multicentered Multipolar Expansions. *Journal of Physical Chemistry. A, Molecules, Spectroscopy, Kinetics, Environment, & General Theory JCR*, v. 112, p. 268-280, 2008.  
Citações: **WEB OF SCIENCE**™ 3 | **SCOPUS** 4
9. CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; **DARDENNE, L. E.** . Molecular Dynamics Simulations of Cruzipains 1 and 2 at Different Temperatures. *Lecture Notes in Computer Science JCR*, v. 4643, p. 158-162, 2007.
10. CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . Genetic Algorithm for Finding Multiple Low Energy Conformations of Poly Alanine Sequences Under an Atomistic Protein Model. *Lecture Notes in Computer Science JCR*, v. 4643, p. 163-166, 2007.  
Citações: **SCOPUS** 1
11. OLIVEIRA, Fernanda Guedes ; SANT ANNA, Carlos Maurício Rabello de ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; **DARDENNE, L. E.** ; BARREIRO, Eliezer J . Molecular docking study and development of an empirical binding free energy model for phosphodiesterase 4 inhibitors. *Bioorganic & Medicinal Chemistry (Print) JCR*, v. 14, p. 6001-6011, 2006.  
Citações: **WEB OF SCIENCE**™ 5 | **SCOPUS** 5
12. SILVA, Alan Wilter da ; BARROS, Carla Osthoff Ferreira de ; OLIVEIRA, Cristiane ; GOMES, Diego Henry Barreto ; HILL, Eduardo ; **DARDENNE, L. E.** ; BARROS, Patricia ; LOUREIRO, Pedro A A G ; PASCUTTI, Pedro Geraldo . The BioPAUÁ Project: A Portal for Molecular Dynamics Using Grid Environment. *Lecture Notes in Computer Science (LNCS) JCR*, v. 3594, p. 214-217, 2005.  
Citações: **SCOPUS** 1
13. ★ MAGALHÃES, Camila Silva de ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . Selection-Insertion Schemes in Genetic Algorithms for the Flexible Ligand Docking Problem. *Lecture Notes in Computer Science JCR*, v. 3102, n.1, p. 368-379, 2004.  
Citações: **WEB OF SCIENCE**™ 3 | **SCOPUS** 5
14. MAGALHÃES, Camila Silva de ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . A genetic algorithm for the ligand-protein docking problem. *Genetics and Molecular Biology JCR*, v. 27, n.4, p. 605-610, 2004.  
Citações: **WEB OF SCIENCE**™ 8 | **SCOPUS** 15
15. DALL'IGNA JÚNIOR, Alcino ; SILVA, Renato Simões ; MUNDIM, Kléber Carlos ; **DARDENNE, L. E.** . Performance and parametrization of the algorithm Simplified Generalized Simulated Annealing. *Genetics and Molecular Biology JCR*, v. 27, n.4, p. 616-622, 2004.  
Citações: **WEB OF SCIENCE**™ 9 | **SCOPUS** 8



16. CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . Investigation of the three-dimensional HP protein folding model using a genetic algorithm. *Genetics and Molecular Biology JCR*, v. 27, n.4, p. 611-615, 2004.  
Citações: **WEB OF SCIENCE™** 13 | **SCOPUS** 24
17. ★ **DARDENNE, L. E.** ; WERNECK, A. S. ; OLIVEIRA NETO, M. ; BISCH, Paulo Mascarello . Electrostatic Properties in the Catalytic Site of Papain: A Possible Regulatory Mechanism for the Reactivity of the Ion pair. *Proteins JCR*, v. 52, n.2, p. 236-253, 2003.  
Citações: **WEB OF SCIENCE™** 25 | **SCOPUS** 25
18. ★ **DARDENNE, L. E.** ; WERNECK, A. S. ; OLIVEIRA NETO, M. ; BISCH, Paulo Mascarello . Reassociation of Fragments Using Multicentered Multipolar Expansions: Peptide Junction Treatments to Investigate Electrostatic Properties of Proteins. *Journal of Computational Chemistry JCR*, v. 22, n.7, p. 689-701, 2001.  
Citações: **WEB OF SCIENCE™** 10 | **SCOPUS** 10
19. **DARDENNE, L. E.** ; MAKIUCHI, N. ; MALBOOUISSON, L. A. ; VIANNA, J. D. M. . Multiplicity, Instability and SCF Convergence Problems in Hartree-Fock Solutions. *International Journal of Quantum Chemistry JCR*, v. 76, n.5, p. 600-610, 2000.  
Citações: **WEB OF SCIENCE™** 4 | **SCOPUS** 4

### Capítulos de livros publicados

1. Ana Carolina Ramos Guimarães ; CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; Miranda, Antonio B ; Degrave WM ; **Dardenne, L.E.** . High-Throughput Genome Analysis for Structure-Based Rational Drug Design: Comparative Genome Analysis and Protein Modeling.. *Introduction to Sequence and Genome Analysis II*. 1ed.: iConcept Press, 2012, v. 2, p. 1-17.
2. MAGALHÃES, Camila Silva de ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . Métodos de Docking Receptro-Ligante para o Desenho Racional de Compostos Bioativos. In: Nelson H. Morgon; Kaline Coutinho. (Org.). *Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular*. 1ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, SP., 2007, v. , p. 489-531.

### Trabalhos completos publicados em anais de congressos

1. MAGALHÃES, Camila Silva de ; BARBOSA, C. H. S. ; ALMEIDA, D. M. ; **Dardenne, L.E.** . Improving Differential Evolution Accuracy for Flexible Ligand Docking Using a Multi-solution Strategy. In: 13th International Conference on Intelligent Data Engineering and Automated Learning, 2012, Natal. *Lecture Notes in Computer Science*, 2012. v. 7435. p. 688-698.
2. CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . Full-Atom Ab Initio Protein Structure Prediction with a Genetic Algorithm using a Similarity-based Surrogate Model. In: IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC), 2010, 2010, Barcelona - Espanha. *IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, 2010, 2010. p. 1-8.
3. ROSSLE, Shaila Cíntia Sykora ; CARVALHO, Paulo C ; **DARDENNE, L. E.** ; BISCH, Paulo Mascarello . Development of A Computational Environment for Protein Structure Prediction and Functional Analysis. In: II Workshop Brasileiro de Bioinformática, 2003, Macaé - RJ. *Anais do II Workshop Brasileiro de Bioinformática*, 2003. p. 57-63.

### Resumos expandidos publicados em anais de congressos

1. CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; **DARDENNE, L. E.** . Ab initio Protein Structure Prediction via Genetic Algorithms using a Coarse-grained Model for Side Chains. In: Brazilian Symposium on Bioinformatics (BSB2010), 2010, Búzios - RJ. *Anais do Brazilian Symposium on Bioinformatics (BSB2010)*, 2010.
2. Gomes L.S.A ; Lifschitz, S. ; CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; **DARDENNE, L. E.** . A Provenance Model for Bioinformatics Workflows. In: Brazilian Symposium on Bioinformatics (BSB2010), 2010, Búzios - RJ. *Anais do Brazilian Symposium on Bioinformatics (BSB2010)*, 2010.
3. Belarmino LC ; CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; Barbosa-Silva, A. ; **DARDENNE, L. E.** . In Silico Screening and Comparative Modeling of Sugarcane Defensins. In: Sixth International Meeting on Computational Intelligence Methods for Bioinformatics and Biostatistics, 2010, Genova - Itália. *Proceedings of CIBB 2009*, 2009.
4. Belarmino, L. C. ; CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; Barbosa-Silva, A. ; **DARDENNE, L. E.** ; Cabral, D. G. A. ; Crovella, S. ; Benko-Iseppon, A. M. . In Silico Screening and Comparative Modeling of Sugarcane Defensins. In: Sixth International Meeting on Computational Intelligence Methods for Bioinformatics and Biostatistics, 2009, Genova - Italia. *Proceedings of CIBB 2009*, 2009.
5. GAUDENCIO, Thais ; GONÇALVES, Reinaldo Bellini ; MAGALHÃES, Camila Silva de ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . Development of a Docking Methodology Using a Multi\_Solution Genetic Algorithm and a Neural Network. In: 4th Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2008, Porto de Galinhas - PE. *Anais do 4th Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry - Drug Design*, 2008.

6. CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; ROSSLE, Shaila Cíntia Sykora ; GUIMARÃES, Ana Carolina R ; CATANHO, Marcos ; BISCH, Paulo M ; **DARDENNE, L. E.** . A Trypanosoma cruzi Genome Study by Sequence-Structure HighThroughput Comparative Modelling: A First Step Towards the Identification of Potential Molecular Targets for Chagas Disease. In: 14th International Conference on Intelligent Systems for Molecular Biology, 2006, Fortaleza, 2006.

7.

**DARDENNE, L. E.** ; GAUDENCIO, Thais ; BARBOSA, Hélio José Correa . Construction of Scoring Functions Using a Neural Network for determination of Affinities Constants. In: 14th International Conference on Intelligent Systems for Molecular Biology, 2006, Fortaleza, 2006.

8. **WERNECK, A. S.** ; R FILHO, Tarcísio M ; **DARDENNE, L. E.** . A General Methodology to Optimize Damping Functions to Account for Charge Penetration Effects in Electrostatic Calculations using Multicentered Multipolar Expansions. In: XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2003, Caxambú - MG. Anais do XII SBQT, 2003. p. 069-069.

### Resumos publicados em anais de congressos

1. Guedes, I.A. ; KREMPSE, E. ; ALMEIDA, D. M. ; DE MAGALHAES, C S ; **Dardenne, L.E.** . The DockThor Portal: a Free Protein-Ligand Docking Server. In: XLII Annual Meeting of SBBq, 2013, Foz do Iguacu - PR. Anais da XLII SBBq, 2013.
2. Trevizani R ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; **Dardenne, L.E.** . Genetic Algorithm for Fragment-Based Protein Structure Prediction. In: XLII Annual Meeting of SBBq, 2013, Foz do Iguacu - PR. Anais da XLII SBBq, 2013.
3. ROCHA, G. K. ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; **Dardenne, L.E.** . How do Implicit Solvation Models are Affected by Different SASA Calculation Models. In: XLII Annual Meeting of SBBq, 2013, Foz do Iguacu - PR. Anais da XLII SBBq, 2013.
4. SANTOS, K. B. ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; **Dardenne, L.E.** . Template Free Protein Structure Prediction Using Backbone Constraint Angles. In: XLII Annual Meeting of SBBq, 2013, Foz do Iguacu - PR. Anais da XLII SBBq, 2013.
5. Guedes, I.A. ; FRAGA, Carlos Alberto Manssour ; **Dardenne, L.E.** . MOLECULAR MODELING OF IKK2 TARGET: STRUCTURAL AND LIGAND BINDING PROPERTIES STUDIES. In: XXII International Symposium on Medicinal Chemistry, 2012, Berlim - Alemanha. Anais do XXII International Symposium on Medicinal Chemistry, 2012.
6. Guedes, I.A. ; FRAGA, Carlos Alberto Manssour ; **Dardenne, L.E.** . Structural and Ligand Binding Properties Studies of the Target IKK2 by Molecular Modeling Techniques. In: XLI Annual Meeting of the Brazilian Society for Biochemistry and Molecular Biology (SBBq), 2012, Foz do Iguacu. Anais da XLI Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular - SBBq, 2012.
7. FREITAS, R. H. C. N. ; Guedes, I.A. ; **Dardenne, L.E.** ; FRAGA, Carlos Alberto Manssour . Síntese de novos derivados N-acilidrazônicos planejados como inibidores de I $\kappa$ B quinase- $\beta$  (IKK $\beta$ ). In: 35 Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2012, Águas de Lindóia. Anais da 35 Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2012.
8. Trevizani R ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; **Dardenne, L.E.** . Fundamental Features of Protein Prediction Using Fragment Libraries. In: 11th European Conference on Computational Biology, 2012, Base - Suíça. Anais of the 11th European Conference on Computational Biology, 2012.
9. ROCHA, G. K. ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; **Dardenne, L.E.** . Protein Structure Prediction and Solvation Models Evaluation. In: 11th European Conference on Computational Biology, 2012, Basel - Suíça. Anais of the 11th European Conference on Computational Biology, 2012.
10. Guedes, I.A. ; FRAGA, Carlos Alberto Manssour ; **Dardenne, L.E.** . Improving Molecular Docking of the Target p38 $\alpha$  MAP Kinase Through an Ensemble Docking Strategy. In: 11th European Conference on Computational Biology, 2012, Basel - Suíça. Anais of the 11th European Conference on Computational Biology, 2012.
11. VIZANI, L. A. ; Guedes, I.A. ; ALMEIDA, D. M. ; DE MAGALHAES, C S ; **Dardenne, L.E.** . Comparative Analysis of Receptor-Ligand Docking Programs. In: II Latin American Federation of Biophysical Societies Congress, 2012, Búzios - Brasil. Abstract Book of the II Latin American Federation of Biophysical Societies Congress, 2012.
12. DE MAGALHAES, C S ; BARBOSA, C. H. S. ; ALMEIDA, D. M. ; **Dardenne, L.E.** . Comparison of Multi-Solution Evolutionary Algorithms for the Molecular Docking Problem. In: II Latin American Federation of Biophysical Societies Congress, 2012, Búzios - Brasil. Book of Abstracts of the II Latin American Federation of Biophysical Societies Congress, 2012.
13. ROCHA, G. K. ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; **Dardenne, L.E.** . Analysis of Implicit Solvation Models in the Context of Ab Initio Protein Structure Prediction. In: II Latin American Federation of Biophysical Societies Congress/XXXVII Brazilian Biophysical Society Congress, 2012, Búzios - Brasil. Abstract Book of the II Latin American Federation of Biophysical Societies Congress, 2012.
14. VIZANI, L. A. ; Guedes, I.A. ; **Dardenne, L.E.** . DockThor: Analysis of Docking Performance Through Comparative Study Using a Diverse and High Quality Test Set. In: XLI Annual Meeting of the Brazilian Society for Biochemistry and Molecular Biology (SBBq), 2012, Foz do Iguacu. Anais do XLI Annual Meeting of the

Brazilian Society for Biochemistry and Molecular Biology (SBBq), 2012.

15.

ROCHA, G. K. ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; Dardenne, L.E. . Evaluate Solvation Models Concerning their Capacity to Distinguish Correctly Folded Structures from Incorrectly Folded and Unfolded. ectly Folded and Unfolded. In: XLI Annual Meeting of the Brazilian Society for Biochemistry and Molecular Biology (SBBq), 2012, Foz do Iguaçu. Anais da XLI Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular - SBBq, 2012.

16. ROCHA, G. K. ; CUSTODIO, Fausto Lima ; Dardenne, L.E. . Analysis of Solvation Models During the Thermal Unfolding of Proteins. In: 5th LNCC Meeting on Computational Modeling, 2012, Petrópolis. Abstarct Bökk of the 5th LNCC Meeting on Computational Modeling, 2012.
17. Trevizani R ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; Soares, Rosemberg O. . Evaluation of the best Features of a Fragment Library for Fragment-based Method for Protein Structure Prediction. In: XLI Annual Meeting of the Brazilian Society for Biochemistry and Molecular Biology (SBBq), 2012, Foz do Iguaçu. Anais da XLI Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular - SBBq, 2012.
18. Guedes, I.A. ; FRAGA, Carlos Alberto Manssour ; Dardenne, L.E. . Structural and Ligand Binding Properties Studies of the IKK2 Molecular Target. In: 5th LNCC Meeting on Computational Modeling, 2012, Petrópolis. Book of Abstracts of the 5th LNCC Meeting on Computational Modeling, 2012.
19. ALMEIDA, D. M. ; MAGALHÃES, Camila Silva de ; BARBOSA, Hélio José Correa ; DARDENNE, L. E. . Dockthor: Development and Validation of a New Docking Program using a Diverse Set of Ligands. In: XVI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2011, Ouro Preto - MG. Anais do XVI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2011.
20. Rocha, G.K. ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; DARDENNE, L. E. . Implementation of a SASA calculation method and a comparative analysis of its impact on different implicit solvation models. In: 7th International Conference of the Brazilian Association for Bioinformatics and Computational Biology (AB3C) and 3rd International Conference of the IberoAmerican Society for Bioinformatics (SoIBio) - X-Meeting 2011, 2011, Florianópolis - SC. Anais do X - Meeting 2011, 2011.
21. Guedes, I.A. ; FRAGA, Carlos Alberto Manssour ; DARDENNE, L. E. . Molecular Modeling of IKKalpha; and IKKbeta: model generation and docking study. In: 5th Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2010, Ouro Preto - MG. Anais do 5th Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2010.
22. Guedes, I.A. ; CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; DARDENNE, L. E. . Comparative modeling of 2,4dienoyl CoA reductase from Trypanosoma cruzi and Homo sapiens: Insights for ligand docking studies. In: : 5th Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2010, Ouro Preto - MG. Anais do : 5th Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2010.
23. BAPTISTA, L. P. R. ; CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; DARDENNE, L. E. . Structure prediction and substrate docking of Leishmania major and Homo sapiens Ribose5phosphate isomerase. In: 5th Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2010, Ouro Preto - 2010. Anais do 5th Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2010.
24. Rocha, G.K. ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; DARDENNE, L. E. . ANALYSIS OF SOLVATION MODELS DURING THE THERMAL UNFOLDING OF PROTEINS. In: X-MEETING 2010, 2010, Ouro Preto - MG. Anais do X-Meeting 2010, 2010.
25. ALMEIDA, D. M. ; MAGALHÃES, Camila Silva de ; DARDENNE, L. E. . DOCKTHOR: SOFTWARE FOR LIGAND FLEXIBLE DOCKING USING A GENETIC ALGORITHM AND MMFF94 FORCE FIELD. In: 5th Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2010, Ouro Preto - MG. Anais do 5th Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2010.
26. DOSSANTOS, K. B. ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; DARDENNE, L. E. . PROFRAGER: AN INTERACTIVE WEB PORTAL FOR CREATING FRAGMENTS LIBRARIES OF PROTEIN STRUCTURES. In: X-Meeting 2010, 2010, Ouro Preto - MG. Anais do X-Meeting 2010, 2010.
27. FERREIRA, D. A. A. ; DARDENNE, L. E. ; CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala . MHOLline: Portal para Modelagem Comparativa em Grande Escala Usando Workflow. In: II Encontro Acadêmico de Modelagem Computacional do LNCC, 2009, Petrópolis - RJ. Anais do II Encontro Acadêmico de Modelagem Computacional do LNCC, 2009.
28. SOARES, Rosemberg de Oliveira ; Batista, PR ; DARDENNE, L. E. ; PASCUTTI, Pedro Geraldo ; SOARES, M. A. . Analise do Impacto da mutação D30N na lateração das características estruturais das proteases dos subtipos B e C do HIV-1 por dinamica molecular. In: XV Simposio Barsileiro de Quimica Teorica, 2009, Poços de Caldas - MG. Anais do XV Simposio Barsileiro de Quimica Teorica, 2009. p. 131-131.
29. SANTOS, K. B. ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; DARDENNE, L. E. . Construção de Bibliotecas de Fragmentos para Predição Ab Initio de Estruturas de Proteínas. In: XV Simposio Barsileiro de Quimica Teorica, 2009, Poços de Caldas - MG. Anais do XV Simposio Barsileiro de Quimica Teorica, 2009. p. 259-259.
30. CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa ; DARDENNE, L. E. . Algoritmos Genéticos para predição ab initio de estrutura de proteínas. In: XV Simposio Barsileiro de Quimica Teorica, 2009, Poços de Caldas - MG. Anais do XV Simposio Barsileiro de Quimica Teorica, 2009. p. 263-263.

31. CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . GAPF, a Multiple Minima Genetic Algorithm for Ab Initio Protein Structure Prediction. In: XVIII International Network of Protein Engineering Centers, 2009, Ubatuba - SP. Anais do XVIII International Network of Protein Engineering Centers, 2009.
32. Trevizani R ; SANTOS, K. B. ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; **DARDENNE, L. E.** . Construction and Accuracy of Fragment Libraries for Protein Structure Prediction. In: XVIII International Network of Protein Engineering Centers, 2009, Ubatuba - SP. Anais do XVIII International Network of Protein Engineering Centers, 2009.
33. CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; FERREIRA, D. A. A. ; BARROS, Patricia ; ROSSLE, Shaila Cíntia Sykora ; BISCH, Paulo M ; **DARDENNE, L. E.** . MHOLline: A Portal For Automatic Analysis and Prediction of Protein Structures. In: XVIII International Network of Protein Engineering Centers, 2009, Ubatuba - SP. Anais do XVIII International Network of Protein Engineering Centers, 2009.
34. CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . AB INITIO PROTEIN STRUCTURE PREDICTION WITH GENETIC ALGORITHMS. In: VII Iberoamerican Congress of Biophysics, 2009, Buzios - RJ. Anais do VII Iberoamerican Congress of Biophysics, 2009.
35. BAPTISTA, L. P. R. ; CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; **DARDENNE, L. E.** . STRUCTURAL PREDICTION AND CATALYTIC SITE ANALYSIS OF Leishmania major RIBOSE-5-PHOSPHATE ISOMERASE TYPE B. In: VII Iberoamerican Congress of Biophysics, 2009, Buzios - RJ. Anais do VII Iberoamerican Congress of Biophysics, 2009.
36. SOARES, Rosemberg de Oliveira ; Batista, PR ; **DARDENNE, L. E.** ; PASCUTTI, Pedro Geraldo ; SOARES, M. A. . Analysis of the Impact of the Mutation D30N in the Characteristic Structure of Proteases of the Subtype B and C of HIV-1 By Molecular Dynamics. In: VII Iberoamerican Congress of Biophysics, 2009, Buzios - RJ. Anais do VII Iberoamerican Congress of Biophysics, 2009.
37. Trevizani R ; SANTOS, K. B. ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; **DARDENNE, L. E.** . Fragment Libraries for Protein Structure Prediction. In: VII Iberoamerican Congress of Biophysics, 2009, Buzios - RJ. Anais do VII Iberoamerican Congress of Biophysics, 2009.
38. MAGALHÃES, Camila Silva de ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** ; Frecer, V. ; Miertus, S. . Genetic Algorithms for Molecular Docking Studies of HIV-1 Protease Inhibitors. In: International Conference on Drug Design and Discovery for Developing Countries, 2008, Trieste - Itália. Anais do International Conference on Drug Design and Discovery for Developing Countries.
39. CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; **DARDENNE, L. E.** . Temperature Effects on Structural Properties of Active Sites: Molecular Dynamics Simulations of Cruzipain Isoforms,. In: 52nd Biophysical Society Annual Meeting / 16th IUPAB International, 2008, Long Beach - Califórnia - USA. Anais do 52nd Biophysical Society Annual Meeting / 16th IUPAB International, 2008.
40. CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; **DARDENNE, L. E.** . Temperature Effects on Structural Properties of Active Sites: Molecular Dynamics Simulations of Cruzipain Isoforms. In: XXXVII Annual Meeting of SBBq and XI Congress of the PABMB, 2008, Águas de Lindóia. Anais do XXXVII Annual Meeting of SBBq and XI Congress of the PABMB, 2008.
41. CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; PEREIRA, E. G. ; SANTOS, K. B. ; **DARDENNE, L. E.** . Molecular Dynamics Simulations of Calmodulin: A Comparative Study of Reaction Field and Particle-Mesh Ewald Electrostatic Treatments. In: X-Meeting 2008- 4th International Conference of the Brazilian Association for Bioinformatics and Computational Biology, 2008, Salvador - BA. Anais do 4th X- Meeting, 2008.
42. LINDEN, Marx Gomes Van Der ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . Resolução de Estruturas de Proteínas Utilizando-se Dados de RMN a Partir de um Algoritmo Genético de Múltiplos Mínimos. In: XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2007, Poços de Caldas - MG. XIV Simpósio Brasileiro de Química teórica, 2007. p. 265-265.
43. CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . Algoritmo Genético para Encontrar Múltiplas Conformações de Proteínas por Primeiros Princípios: Estudo em Poli-Alaninas. In: XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2007, Poços de Caldas - MG. XIV Simpósio Brasileiro de Química teórica, 2007. p. 263-263.
44. CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; **DARDENNE, L. E.** . Structural Analysis of the Catalytic Site of Cruzipain Isoforms by Molecular Dynamics Simulations at Different Temperatures. In: XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2007, Poços de Caldas - MG. XIV Simpósio Brasileiro de Química teórica, 2007. p. 278-278.
45. SILVA, João Hermínio Martins da ; **DARDENNE, L. E.** ; SAVINO, Wilson ; CAFFARENA, Ernesto Raul . Interactions Between Extracellular Matrix Receptors VLA-1 and VLA-4 and Specific Inhibitors: Molecular Modeling Studies. In: IV International Symposium on Extra Cellular Matrix, 2006, Búzios - RJ. IV International Symposium on Extra Cellular Matrix - Abstract Book, 2006.
46. CAFFARENA, Ernesto Raul ; SANT'ANNA, Maurício R ; **DARDENNE, L. E.** . Computational Calculations of R, S Rolipram Affinities for The PDE4B Enzyme. In: Workshop on Biocalorimetry and Biological Thermodynamics, 2006, Rio de Janeiro. Workshop on Biocalorimetry and Biological Thermodynamics - Abstract Book, 2006.
47. CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; ROSSLE, Shaila Cíntia Sykora ; Otto T ; GUIMARÃES, Ana Carolina R ; CATANHO, Marcos ; BISCH, Paulo Mascarello ; Degraive W ; **DARDENNE, L. E.** . A trypanosoma cruzi Genome Study by Sequence-Structure HighThroughput Comparative Modelling and Enzymatic/Evolutionary Approach: Steps to the Identification of Potential Molecular Targets for Chagas Disease. In: 3rd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2006, São Pedro-SP. 3rd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry - Abstract Book, 2006. p. S-195.

48. REGO, T. G. ; VTS, S. ; LIMA, Lídia Moreira ; BARBOSA, Hélio José Correa ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; SANT ANNA, Carlos Maurício Rabello de ; **DARDENNE, L. E.** . Development of Empirical Free Energy Scoring Functions using a Neural Network for the Determination of Binding Affinities Constants for Phosphodiesterase-4. In: 3rd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2006, São Pedro - SP. 3rd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry - Abstract Book, 2006. p. S3-194.
  
49. **MAGALHÃES, Camila Silva de ; BARBOSA, Hélio José Correa ; DARDENNE, L. E.** . Croos-Docking of Highly Flexible Ligands Using a Multi-Solution Genetic Algorithm Strategy. In: 3rd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2006, São Pedro - SP. 3rd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry - Abstract Book, 2006. p. S3 - 2007.
50. CAFFARENA, Ernesto Raul ; MARTINS, J. H. ; **DARDENNE, L. E.** ; SAVINO, Wilson . Molecular interactions between VLA-4 integrin and specific inhibitors. In: The first african structural biology conference - FASB 2006, 2006, The wilderness, South Africa. The first african structural biology conference - FASB 2006, 2006.
51. CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; ROSSLE, Shaila Cíntia Sykora ; Otto T ; GUIMARÃES, Ana Carolina R ; CATANHO, Marcos ; BISCH, Paulo Mascarelo ; Degrave W ; **DARDENNE, L. E.** . A Trypanosoma cruzi Genome Study by Sequence-Structure HighThroughput Comparative Modelling and Enzymatic/Evolutionary Approach: Steps to the Identification of Potential Molecular Targets for Chagas' Disease. In: XXII Annual Meeting of the Brazilian Society of Protozoology/ XXIII Annual Meeting on Basic Research in Chagas' Disease, 2006, Caxambú - MG. Anais do XXII Annual Meeting of the Brazilian Society of Protozoology/ XXII Annual Meeting of the Brazilian Society of Protozoology/ Anais do XXIII Annual Meeting on Basic Research in Chagas' Disease, 2006.
52. CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . A Genetic Algorithm for Finding Multiple Low Energy Conformations under the 3D HP Protein Model. In: International Bio-physics Congress 2005, 2005, Montpellier - Franca. International Bio-physics Congress 2005, 2005.
53. DALL'IGNA JÚNIOR, Alcino ; **DARDENNE, L. E.** . Cross-Docking of Highly Flexible Ligands using a Multisolution-GSA Docking Method. In: International Bio-physics Congress 2005, 2005, Montpellier - Franca. International Bio-physics Congress 2005, 2005.
54. OLIVEIRA, Fernanda Guedes ; SANT ANNA, Carlos Maurício R. de ; **DARDENNE, L. E.** ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; BARREIRO, Eliezer de Jesus . Estudo de Docking do Perfil de Interação de Fosfodiesterase 4 com seus Inibidores. In: XXVI Congresso Latinoamericano de Química e 27a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química - SBQ, 2004, Salvador - BA, 2004.
55. ROSSLE, Shaila Cíntia Sykora ; CARVALHO, Paulo C ; LERY, Lsm ; **DARDENNE, L. E.** ; BISCH, Paulo Mascarelo . Structural Analysis of Gluconacetobacter diazotrophicus Genome using MHOL3D.. In: XXXIII Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular, 2004, Caxambú - MG, 2004.
56. **DARDENNE, L. E.** ; DALL'IGNA JÚNIOR, Alcino ; SILVA, Alan Wilter da ; MUNDIM, Kléber Carlos ; PASCUTTI, Pedro Geraldo . A Multisolution-GSA Docking Method to Predict Distinct Ligand-Receptor Binding Modes. In: 1st Latin American Protein Society Meeting, 2004, Angra dos Reis. Anais do 1st Latin American Protein Society Meeting, 2004. v. 1. p. 263-263.
57. OLIVEIRA, Fernanda Guedes ; SANT ANNA, Carlos Maurício R. de ; **DARDENNE, L. E.** ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; BARREIRO, Eliezer de Jesus . Molecular Modeling Study of the Interaction Profile of Phosphodiesterase 4 and its Inhibitors. In: 2nd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2004, Rio de Janeiro. Anais do 2nd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2004. v. 1. p. 81-81.
58. **MAGALHÃES, Camila Silva de ; BARBOSA, Hélio José Correa ; DARDENNE, L. E.** . Flexible Ligand Docking using Multiple Solution Strategies in Genetic Algorithms. In: 2nd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2004, Rio de Janeiro. Anais do 2nd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2004. v. 1. p. 82-82.
59. CAFFARENA, Ernesto Raul ; OLIVEIRA, Fernanda Guedes ; SANT ANNA, Carlos Maurício R. de ; **DARDENNE, L. E.** ; BARREIRO, Eliezer de Jesus . Theoretical Determination of Rolipram Affinity for Phosphodiesterase 4 by Free Energy Perturbation Method. In: 2nd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2004, Rio de Janeiro. 2nd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry, 2004. v. 1. p. 82-82.
60. DALL'IGNA JÚNIOR, Alcino ; SILVA, Renato Simões ; MUNDIM, Kléber Carlos ; **DARDENNE, L. E.** . Optimal Parameter Sets for the SGSA Algorithm. In: XXVII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, 2004, Porto Alegre - RS. Anais do XXVII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional.
61. OLIVEIRA, Fernanda Guedes ; SANT ANNA, Carlos Maurício R. de ; **DARDENNE, L. E.** ; BARREIRO, Eliezer de Jesus . Interaction Model Way of Phosphodiesterase Inhibithors. In: 4th Congress of Pharmaceutical Sciences, 2003, Ribeirão Preto, 2003.
62. CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . Investigation of the Three-Dimensional Lattice HP Protein Folding Model using a genetic Algorithm. In: 1st International Conference on Bioinformatics and Computational Biology, 2003, Ribeirão Preto, 2003.
63. DALL'IGNA JÚNIOR, Alcino ; SILVA, Renato Simões ; MUNDIM, Kléber Carlos ; **DARDENNE, L. E.** . Performance and parametrization of the algorithm Simplified Generalized Simulated Annealing. In: 1st

International Conference on Bioinformatics and Computational Biology, 2003, Ribeirão Preto, 2003.

64.

MAGALHÃES, Camila Silva de ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . A Genetic Algorithm for the Ligand-Protein Docking Problem. In: 1st International Conference on Bioinformatics and Computational Biology, 2003, Ribeirão Preto, 2003.

65. CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . A Genetic Algorithm Approach to the 3D Hydrophobic-Polar Protein Model. In: V IberoAmerican Congress of Biophysics, 2003, Rio de Janeiro. Anais do V Congresso Ibero-Americano de Biofísica, 2003.

66. DALL'IGNA JÚNIOR, Alcino ; SILVA, Renato Simões ; MUNDIM, Kléber Carlos ; **DARDENNE, L. E.** . Parametrization of the Algorithm Simplified Generalized Simulated Annealing. In: V IberoAmerican Congress of Biophysics, 2003, Rio de Janeiro -RJ - Brasil. Anais do V Congresso Ibero-Americano de Biofísica, 2003.

67. MAGALHÃES, Camila Silva de ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . Rigid and Flexible Ligand Docking using a Steady-State Genetic Algorithm and a Grid-Based Methodology. In: V IberoAmerican Congress of Biophysics, 2003, Rio de Janeiro - Brasil. Anais do V Congresso Ibero-Americano de Biofísica, 2003.

68. ROSSLE, Shaila Cíntia Sykora ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; **DARDENNE, L. E.** ; BISCH, Paulo Mascarelo . Study of T-Cell Receptor/Superantigen Interaction by Computational Analysis. In: V IberoAmerican Congress of Biophysics, 2003, Rio de Janeiro, 2003.

69. **DARDENNE, L. E.** ; CAFFARENA, Ernesto Raul . Evaluation of a Molecular Dynamics Flexible Docking. In: Workshop on Molecular Modeling in Biophysics, 2002, Rio de Janeiro, 2002.

70. **DARDENNE, L. E.** ; MUNDIM, Kléber Carlos ; WERNECK, A. S. . Optimization of Damping Functions to Correct Molecular Electrostatic Properties Calculated with the Multipolar Multicentered Expansions Method. In: XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2001, Caxambú/MG, 2001.

71. **DARDENNE, L. E.** ; MUNDIM, Kléber Carlos ; SILVA, Alan Wilter da ; PASCUTTI, Pedro Geraldo . A Grid-Based Docking Methodology Using the Generalized Simulated Annealing Optimization Method to Predict Ligand-Protein Conformations. In: XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2001, Caxambú/MG, 2001.

72. ROSSLE, Shaila Cíntia Sykora ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; **DARDENNE, L. E.** ; BISCH, Paulo Mascarelo . Stochastic Molecular Dynamics Simulations of the Interaction between the T-Cell Receptor Cw3/1.1 and the Superantigen SEC2 in Aqueous Solution. In: IV Biophysics Congress of the Southern Cone, 2000, Campinas/SP. Anais do IV Biophysics Congress of the Southern Cone, 2000.

73. **DARDENNE, L. E.** ; WERNECK, A. S. ; OLIVEIRA NETO, M. ; BISCH, Paulo Mascarelo . Electrostatic Properties in the Catalytic Site of Papain. In: Symposium Understanding Protein Electrostatics, 2000, Stockholm. Anais do Symposium Understanding Protein Electrostatics, 2000.

74. **DARDENNE, L. E.** ; WERNECK, A. S. ; OLIVEIRA NETO, M. ; BISCH, Paulo Mascarelo . Propriedades Eletrostáticas do Sítio Ativo de Cisteíno Proteases Pertencentes à Superfamília da Papaína. In: XXIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2000, São Lourenço/MG. Anais do XXIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2000.

75. CAFFARENA, Ernesto Raul ; **DARDENNE, L. E.** ; PASCUTTI, Pedro Geraldo ; BISCH, Paulo Mascarelo . Interpolation Methods Adapted to Stochastic Molecular Dynamics for Simulating Complex Biological Systems. In: IV Biophysics Congress of the Southern Cone, 2000, Campinas/SP, 2000.

76. WERNECK, A. S. ; **DARDENNE, L. E.** . Estudo Comparativo de Propriedades de Sistemas Interagentes Utilizando Expansão Multipolar. In: X Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 1999, Caxambú/MG. Anais do X Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 1999.

77. **DARDENNE, L. E.** ; WERNECK, A. S. ; OLIVEIRA NETO, M. ; BISCH, Paulo Mascarelo . Cálculo de Propriedades Eletrostáticas de Proteínas através do Método de Reassociação de Fragmentos Utilizando Expansões Multipolares Multicentradas: Um Estudo do Tratamento da Junção Peptídica. In: X Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 1999, Caxambú/MG. Anais do X Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 1999.

78. **DARDENNE, L. E.** ; WERNECK, A. S. ; OLIVEIRA NETO, M. ; BISCH, Paulo Mascarelo . Electrostatic Properties in the Active Site of Homologous Proteins: A Comparative Study Involving Cysteine Proteinases of the Papain Superfamily. In: X Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 1999, Caxambú/MG. Anais do X Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 1999.

79. **DARDENNE, L. E.** ; WERNECK, A. S. ; OLIVEIRA NETO, M. ; BISCH, Paulo Mascarelo . A Theoretical Study on the Electrostatic Properties in the Active Site of Papain. In: XIII International Biophysics Congress, 1999, New Delhi. Journal of Biosciences, 1999. v. 24. p. 171-171.

80. **DARDENNE, L. E.** ; WERNECK, A. S. ; OLIVEIRA NETO, M. ; BISCH, Paulo Mascarelo . Investigação das Propriedades Eletrostáticas na região do Sítio Ativo do Complexo Papaína-Leupeptina. In: XXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1998, Caxambú/MG. Anais do XXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1998.

81. **DARDENNE, L. E.** ; MORET, M. G. ; BISCH, Paulo Mascarelo . Study of the Papain-Leupeptin Complex by Classical Molecular Dynamics, Quantum Mechanical and Stochastic Methods. In: International Symposium on Protein Condensation - In Honor of Gregorio Weber, 1997, Rio de Janeiro/RJ. Anais do International Symposium on Protein Condensation, 1997.

82. MORET, M. G. ; **DARDENNE, L. E.** ; PASCUTTI, Pedro Geraldo ; BISCH, Paulo Mascarelo . Análise Conformacional Estocástica de Inibidores usando Generalized Simulated Annealing - GSA. In: XX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1997, Caxambú/MG. Anais do XX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1997.
83. **DARDENNE, L. E.** ; MAKIUCHI, N. ; MALBOOUISSON, L. A. ; VIANNA, J. D. M. . Instabilidades e Problemas de Convergência de Soluções Hartree-Fock. In: XIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1996, Águas de Lindóia/MG. Anais do XIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1996.
84. **DARDENNE, L. E.** ; MAKIUCHI, N. ; MALBOOUISSON, L. A. ; VIANNA, J. D. M. . Multiplicidade e Instabilidades de Soluções Hartree-Fock. In: VIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 1995, Caxambú/MG. Anais do VIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 1995.
85. **DARDENNE, L. E.** ; WERNECK, A. S. ; MAKIUCHI, N. ; VIANNA, J. D. M. ; MOREIRA, S. ; MALBOOUISSON, L. A. . Curvas de dissociação utilizando o Método Algébrico. In: XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1994, Caxambú/MG. Anais do XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1994.
86. MAKIUCHI, N. ; WERNECK, A. S. ; **DARDENNE, L. E.** ; VIANNA, J. D. M. ; MOREIRA, S. ; MALBOOUISSON, L. A. . Um Método CI não ortogonal usando múltiplas soluções Hartree-Fock. In: XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1994, Caxambú/MG. Anais do XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1994.
87. **DARDENNE, L. E.** ; MAKIUCHI, N. . Estrutura Eletrônica de Moléculas Biológicas. In: XVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1993, Caxambú/MG - Brasil. Anais do XVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1993.
88. **DARDENNE, L. E.** ; MAKIUCHI, N. . Estudo de Transferência de carga no Modelo Transdução Visual. In: XV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada., 1992, Caxambú/MG - Brasil. Anais do XV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada., 1992.

### Apresentações de Trabalho

1. **Dardenne, L.E.** . Strategies for Ab Initio Protein Structure Prediction. 2013. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
2. **Dardenne, L.E.** . Projeto Dockthor: Um Programa Brasileiro para o Desenho Racional de Fármacos. 2013. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
3. **Dardenne, Laurent E.** . O Portal Dockthor para Docking Receptor-Ligante. 2013. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
4. **Dardenne, L.E.** . Dockthor: Development and Validation of a New Docking Program. 2012. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
5. **Dardenne, L.E.** . Predição de Estruturas de Proteínas: Desenvolvimento de Métodos, Algoritmos e Programas. 2012. (Apresentação de Trabalho/Seminário).
6. **Dardenne, L.E.** . Programa Dockthor: Docking Receptor-Ligante. 2012. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
7. **Dardenne, L.E.** . Development and Validation of a New Multi-Solution Receptor-Ligand Docking Program. 2012. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
8. **Dardenne, L.E.** . Moléculas da Vida (DNA e Proteínas). 2012. (Apresentação de Trabalho/Seminário).
9. **DARDENNE, L. E.** . Ab Iniito Protein Structure Prediction using All-Atom and Coarse Grained Models. 2011. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
10. **DARDENNE, L. E.** . Metodologias de Docking Receptor-Ligante. 2011. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
11. **DARDENNE, L. E.** . Metodologias De Docking Receptor-Ligante: Desenvolvimento e Aplicações. 2011. (Apresentação de Trabalho/Seminário).
12. **DARDENNE, L. E.** . Dockthor: Development and Validation of a Ligand-Receptor Docking Program. 2011. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
13. **DARDENNE, L. E.** . Predição de Estruturas de Proteínas por Primeiros Princípios. 2010. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
14. **DARDENNE, L. E.** . First Principles protein structure prediction using genetic algorithms. 2010. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
15. **DARDENNE, L. E.** . Desenvolvimento de Aplicações em Ciências Biológicas Utilizando Computação de Alto Desempenho. 2010. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
16. **DARDENNE, L. E.** . Recozimento Simulado. 2009. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
17. **DARDENNE, L. E.** . Algoritmos Genéticos Aplicados ao Problema de Docking Receptor-Ligante e à Predição de Estruturas de Proteínas. 2009. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
18. **DARDENNE, L. E.** . Predição de Estruturas de Proteínas e de Complexos Receptor-Ligante: Desenvolvimento de Métodos, Algoritmos e Programas. 2009. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
19. **DARDENNE, L. E.** . Ab Iniito Structure Prediction With Genetic Algorithms. 2009. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).
20. **DARDENNE, L. E.** . Metodologias de Docking Receptor-Ligante. 2009. (Apresentação de Trabalho/Conferência

ou palestra).

21.

**DARDENNE, L. E.** . Métodos e Algoritmos para a Determinação e Avaliação de Estruturas Biomoleculares. 2009. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

22. **CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; DARDENNE, L. E.** . Temperature Effects on Structural Properties of Active Sites: Molecular Dynamics Simulations of Cruzipain Isoforms. 2008. (Apresentação de Trabalho/Comunicação).

23. **DARDENNE, L. E.** . Cross-docking of highly flexible ligands using a multi-solution algorithm strategy. 2007. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

24. **DARDENNE, L. E. ; BARBOSA, Hélio José Correa ; CUSTÓDIO, Fábio Lima** . Genetic Algorithms for Ab Initio Protein Structure Prediction. 2007. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

25. **DARDENNE, L. E.** . Molecular Modeling Methodologies for the Identification and Investigation of Molecular Targets and Bioactive Compounds. 2006. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

26. **DARDENNE, L. E.** . Metodologias de Docking Receptor-Ligante. 2006. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

27. **DARDENNE, L. E.** . Metodologias de Modelagem Molecular Aplicada a Identificação e Estudo de Alvos Moleculares e Compostos Bioativos. 2006. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

28. **DARDENNE, L. E.** . Modelagem Molecular: Teoria e Aplicações em Sistemas de Interesse Biológico. 2006. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

29. **DARDENNE, L. E.** . Cross-docking of highly flexible ligands using a multisolution-GSA. 2005. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

30. **DARDENNE, L. E.** . Simulação de Macromoléculas Biológicas: Aplicações na Área de Desenho Racional de Fármacos. 2005. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

31. **DARDENNE, L. E.** . Metodologias de Docking para o Desenho Racional de Fármacos. 2004. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

32. **DARDENNE, L. E.** . Metodologias de Docking Receptor-Ligante. 2004. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

33. **DARDENNE, L. E.** . Modelagem Molecular de Macromoléculas Biológicas. 2004. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

34. **DARDENNE, L. E.** . Simulação de Macromoléculas Biológicas: Aplicações na Área de Desenho Racional de Fármacos. 2004. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

35. **DARDENNE, L. E.** . Física Molecular, Ciências de Materiais e Biofísica: Estado da Arte e Perspectivas. 2004. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

36. **DARDENNE, L. E.** . Metodologias de Docking Recepto-Ligante visando o Desenho Racional de Fármacos. 2003. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

37. **DARDENNE, L. E.** . Cálculo de Propriedades Eletrostáticas em Sítios Catalíticos de Enzimas utilizando a Equação Linearizada de Poisson-Boltzmann acoplada ao uso de Expansões Multipolares Multicentradas derivadas de Cálculos Quânticos ab initio. 2003. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

38. **DARDENNE, L. E.** . Campos de Força Clássicos. 2002. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

39. **DARDENNE, L. E.** . Docking Molecular Receptor-Ligante. 2002. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

40. **DARDENNE, L. E.** . Propriedades Eletrostáticas do Sítio Ativo de Cisteíno Proteinases da Família da Papaína. 2001. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

41. **DARDENNE, L. E.** . Propriedades Eletrostáticas do Sítio Ativo de Cisteíno Proteinases da Família da Papaína. 2001. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

42. **DARDENNE, L. E.** . Propriedades Eletrostáticas da Papaína: Um Estudo Quantum-Mecânico Ab Initio do Sítio de Interação. 2001. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

43. **DARDENNE, L. E. ; WERNECK, A. S. ; OLIVEIRA NETO, M. ; BISCH, Paulo Mascarelo** . Propriedades Eletrostáticas do Sítio Ativo de Cisteíno Proteases Pertencentes à Superfamília da Papaína. 2000. (Apresentação de Trabalho/Comunicação).

44. **DARDENNE, L. E. ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; PASCUTTI, Pedro Geraldo ; BISCH, Paulo Mascarelo** . Interpolation Methods Adapted to Stochastic Molecular Dynamics for Simulating Complex Biological Systems. 2000. (Apresentação de Trabalho/Comunicação).

45. **DARDENNE, L. E. ; WERNECK, A. S. ; OLIVEIRA NETO, M. ; BISCH, Paulo Mascarelo** . A Theoretical Study on the Electrostatic Properties in the Active Site of Papain. 1999. (Apresentação de Trabalho/Comunicação).

46. **DARDENNE, L. E. ; WERNECK, A. S. ; MAKIUCHI, N. ; VIANNA, J. D. M. ; MALBOUISSON, L. A. ; MOREIRA, S.** . Um Método CI não ortogonal usando múltiplas soluções Hartree-Fock. 1994. (Apresentação de Trabalho/Comunicação).

47. **DARDENNE, L. E. ; MAKIUCHI, N.** . Estudo de Transferência de Carga no Modelo Transdução Visual. 1992. (Apresentação de Trabalho/Comunicação).



## Produção técnica

### Programas de computador sem registro

1. **Dardenne, L.E.** ; DE MAGALHAES, C S ; ALMEIDA, D. M. ; BARBOSA, Hélio José Correa ; Guedes, I.A. ; KREMPSE, E. . Portal Dockthor. 2013.
2. **DARDENNE, L. E.** ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; DOSSANTOS, K. B. . Portal ProFragr. 2012.
3. **DARDENNE, L. E.** ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; BARBOSA, Hélio José Correa . GAPF 2.0. 2011.
4. **DARDENNE, L. E.** ; CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; ROSSLE, Shaila Cíntia Sykora ; BISCH, Paulo Mascarelo . Portal MHOLline. 2009.
5. **DARDENNE, L. E.** ; CAPRILES, Priscila Vanessa da Silva Zabala ; FRAGA, Carlos Alberto Manssour ; BARREIRO, Eliezer de Jesus . LLDB - LASSBio Ligand Data Bank. 2009.
6. **DARDENNE, L. E.** ; PASCUTTI, Pedro Geraldo ; SILVA, Alan Wilter da ; BARROS, Carla Osthoff Ferreira de ; GOMES, Diego Henry Barreto ; OLIVEIRA, Cristiane ; HILL, Eduardo ; LOUREIRO, Pedro A A G ; BARROS, Patricia . Portal BIOPAUA. 2005.
7. **DARDENNE, L. E.** ; WERNECK, A. S. . OME-LPB. 2000.
8. **DARDENNE, L. E.** ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; ORTMANS, I. ; LOOS, M. . PDBTHORBOX. 1999.

### Trabalhos técnicos

1. **DARDENNE, L. E.** . Desenvolvimento de metodologias de docking acopladas à utilização de computação de alto desempenho visando o desenho racional de compostos bioativos. 2001.

### Demais tipos de produção técnica

1. **DARDENNE, L. E.** . Métodos Computacionais Aplicados ao Planejamento de Compostos Bioativos. 2009. (Curso de curta duração ministrado/Especialização).
2. **DARDENNE, L. E.** . Modelagem Molecular de Macromoléculas Biológicas. 2004. (Curso de curta duração ministrado/Especialização).
3. **DARDENNE, L. E.** ; BISCH, Paulo Mascarelo ; SILVA, Alan Wilter da ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; PASCUTTI, Pedro Geraldo ; ROSSLE, Shaila Cíntia Sykora ; SOUZA, Elias Ramos de . Modelagem Computacional de Sistemas Biológicos. 2004. (Curso de curta duração ministrado/Especialização).
4. **DARDENNE, L. E.** ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; PASCUTTI, Pedro Geraldo . Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos. 2003. (Curso de curta duração ministrado/Especialização).
5. **DARDENNE, L. E.** . Modelagem Molecular de Macromoléculas Biológicas. 2003. (Curso de curta duração ministrado/Especialização).
6. **DARDENNE, L. E.** . Cálculos de Estrutura Eletrônica em Moléculas. 1996. (Curso de curta duração ministrado/Especialização).

## Patentes e registros

---

### Programa de computador

1. CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **Dardenne, L.E.** . Hypofold. 2009.  
Patente: Programa de Computador. Número do registro: 14015-4, título: "Hypofold" , Instituição de registro:INPI - Instituto Nacional da Propriedade Industrial.
2. CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **DARDENNE, L. E.** . GAHP - Genetic Algorithm for HP Model. 2010.  
Patente: Programa de Computador. Número do registro: 13316-6, título: "GAHP - Genetic Algorithm for HP Model" , Instituição de registro:INPI - Instituto Nacional da Propriedade Industrial.
3. MAGALHÃES, Camila Silva de ; ALMEIDA, D. M. ; BARBOSA, Hélio José Correa ; **Dardenne, Laurent E.** . Dockthor. 2012.  
Patente: Programa de Computador. Número do registro: 13318-3, título: "Dockthor" , Instituição de registro:INPI - Instituto Nacional da Propriedade Industrial.
4. **Dardenne, Laurent E** ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa . GAPF - Genetic Algorithm for Protein Folding. 2012.  
Patente: Programa de Computador. Número do registro: 13317-1, título: "GAPF - Genetic Algorithm for Protein Folding" , Instituição de registro:INPI - Instituto Nacional da Propriedade Industrial.
5. CUSTÓDIO, Fábio Lima ; **DARDENNE, L. E.** ; DOSSANTOS, K. B. . Profrager. 2012.  
Patente: Programa de Computador. Número do registro: 13315-4, título: "Profrager" , Instituição de registro:INPI - Instituto Nacional da Propriedade Industrial.

### Bancas

---

## Participação em bancas de trabalhos de conclusão

### Mestrado

1. **Dardenne, L.E.**; REBOREDO, E. H.; MONTALVAO, R. W.. Participação em banca de Amanda Souza Câmara. Uma transição assimétrica entre estados simétrico: o alosterismo da Glucosamina 6-fosfato Desaminase. 2013. Dissertação (Mestrado em Física (Sc)) - Universidade de São Paulo.
2. **Dardenne, L.E.**; NASCIMENTO, M. A. C.; ALENCASTRO, R. B.; TAVARES, F. W.. Participação em banca de Laura Joana Silva Lopes. SpecIFFic: Desenvolvimento e Aplicação de um Programa para a Construção de Campos de Força Específicos. 2013. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.
3. **Dardenne, L.E.**; LEITE, V. B. P.; CARVALHO, S. J.. Participação em banca de Antônio Bento de Oliveira. Visualização do Funil de Enovelamento de Proteínas. 2013. Dissertação (Mestrado em Biofísica Molecular) - Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho.
4. **Dardenne, L.E.**; SEGALA, M.; LIVOTTO, P. R.. Participação em banca de Helen Nathalia Thompson. Mudanças Estruturais na Proteína Prion Celular Induzidas por Alteração de pH. 2012. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
5. **DARDENNE, L. E.**; Matoso, M.L.Q.; Lifschitz, S.. Participação em banca de Luciana da Silva Almendra Gomes. Proveniência de dados para Workflows de Bioinformática. 2011. Dissertação (Mestrado em Informática) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.
6. NETZ, P. A.; Termignoni C.; **Dardenne, Laurent E.** Participação em banca de Edson Fauth Vargas Filho. Caracterização Estrutural e Conformacional de Toxinas da Família das Actinoporinas. 2010. Dissertação (Mestrado em Programa de Pós-Graduação em Biologia Celular e Molecular) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
7. **BARBOSA, Hélio José Correa**; EBECKEN, N. F. F.; **DARDENNE, L. E.**. Participação em banca de Eduardo Krempser da Silva. Evolução Diferencial para Problemas de Otimização Restrita. 2009. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
8. **DARDENNE, L. E.**; COSTA, J. B. N.; SANT ANNA, Carlos Maurício R. de. Participação em banca de José Geraldo Rocha Júnior. Desenvolvimento de um Modelo Empírico de Predição da Atividade de Inibidores da Esterol 14-alfa Desmetilase (CYP51) Utilizando o Método Semi-Empírico PM6. 2009. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro.
9. **DARDENNE, L. E.**; BISCH, Paulo Mascarelo; Abdelhay ESWF. Participação em banca de Elen Gomes Pereira. Estudo Estrutural e Termodinâmico de Mutantes da Proteína c-ABL resistentes ao Imatinib. 2009. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
10. **DARDENNE, L. E.**; LIMA, A. P. C. A.; LEAL, K. Z.. Participação em banca de Mauricio Garcia de Souza Costa. Estudo Computacional de Interações entre a Heparina e Proteínas envolvidas na angiogênese tumoral. 2009. Dissertação (Mestrado em Ciências Biológicas (Biofísica)) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.
11. **DARDENNE, L. E.**; **BARBOSA, Hélio José Correa**; RAUPP, Fernanda; TAKAHASHI, R. H. C.; EBECKEN, N. F. F.. Participação em banca de Luciana Rocha Pedro. Uma Nova Representação para o Problema de Predição de Estrutura de Proteínas em Grades. 2008. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
12. FRAGA, Carlos Alberto Manssour; SANT ANNA, Carlos Maurício R. de; **DARDENNE, L. E.**; Alencastro, R.B.. Participação em banca de Guilherme Barroso Langoni de Freitas. Desenvolvimento de Modelos COMFA e COMSIA de Afinidade e Seletividade para Ligantes Indólicos dos Receptores Canabinóides CB1 e CB2. 2008. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.
13. **BARBOSA, Hélio José Correa**; BORGES, C. C. H.; **DARDENNE, L. E.**. Participação em banca de Samuel Belini Defilippo. Ferramenta Computacional para Apoio à Análise de Regressão de Dados. 2008. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Universidade Federal de Juiz de Fora.
14. **BARBOSA, Hélio José Correa**; **DARDENNE, L. E.**; RAUPP, Fernanda Maria Pereira; TAKAHASHI, R. H. C.. Participação em banca de Jaqueline da Silva Angelo. Algoritmos Baseados em Colônia de Formigas para Otimização Multiobjetivo. 2008. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
15. **DARDENNE, L. E.**; Quilfedt J.A.; Idiart M.A.P.; Monteiro A.V.. Participação em banca de Cristiano de Lima Hackmann. Modelos Matemáticos para o Transporte de Íons por Canais em membranas de Axônios. 2007. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
16. **DARDENNE, L. E.**; Termignoni C.; Schroeder E.. Participação em banca de Camila Franco Becker. Caracterização do Reconhecimento Molecular de Polissacarídeos de Ouriço-do-Mar pela Antitrombina Utilizando Técnicas de Modelagem Molecular. 2007. Dissertação (Mestrado em Biologia Celular e Molecular) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
17. **DARDENNE, L. E.**; LIVOTTO, Paolo Roberto; SILVEIRA, Nadya Pesce da. Participação em banca de Raquel da Silva Leviski. Estudo Computacional da Interação Entre Bicamada Lipídica Aniônica e Moricina. 2006. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

18. **DARDENNE, L. E.**; RUSSO, Cláudia A M; MARGIS, Márcia. Participação em banca de Cláudia Elizabeth Thompson. Divergência Funcional da Família gênica da álcool desidrogenase em plantas. 2006. Dissertação (Mestrado em Genética e Biologia Molecular) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
19. **DARDENNE, L. E.**; VILLAR, José Daniel Figueroa; WEISSMULLER, G.. Participação em banca de Diego Enry Barreto Gomes. Estudo da falcipaina-2 em complexo com ligantes por modelagem e dinâmica molecular como suporte ao desenvolvimento racional de novos fármacos. 2006 - Instituto de biofísica Carlos Chagas Filho.
20. **DARDENNE, L. E.**; FERNADEZ, J. H.; SILVA, R. C.. Participação em banca de João Hermínio Martins da Silva. Análise Estrutural da integrina alfa4beta1 e ligantes específicos: estudo por modelagem molecular. 2006 - Instituto de biofísica Carlos Chagas Filho.
21. **DARDENNE, L. E.**; PASCUTTI, Pedro Geraldo; BISCH, Paulo Mascarelo; ALMEIDA, Fabio Ceneviva Lacerda. Participação em banca de Paulo Ricardo Batista. Estudos Computacionais da Protease do HIV-1: Abertura das alças e diferenças entre subtipos. 2005. Dissertação (Mestrado em Ciências Biológicas (Biofísica)) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.
22. **DARDENNE, L. E.**; BARREIRO, Eliezer de Jesus; VILLAR, José Daniel Figueroa; SANT ANNA, Carlos Maurício R. de; CAFFARENA, Ernesto Raul; ESTEVES, Pierre Motte. Participação em banca de Fernanda Guedes Oliveira. Estudo do Perfil de Interação de Fosfodiesterase 4 com seus Inibidores. 2005. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.
23. **DARDENNE, L. E.**; PORTUGAL, Renato; ROSA, Luiz Pinguelli; OLIVEIRA JÚNIOR, Ivan dos Santos; GALEÃO, Augusto César Nogueira Rodrigues. Participação em banca de Jean Faber Ferreira de Abreu. Computação Quântica em Sistemas Abertos e uma Aplicação ao Modelo Biológico de FRÖHLICH. 2004. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
24. **DARDENNE, L. E.**; BARREIRO, Eliezer; SANTANNA, Carlos Maurício R; VILLAR, José Daniel Figueroa; LIMA, Lídia Moreira; MACHADO, Sérgio de Paula. Participação em banca de Monique Araújo de Brito. Modelos de COMFA e COMSIA de Antagonistas Alfa-1 Adrenérgicos N-Fenilpiperazínicos. 2004. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.

### Teses de doutorado

1. **Dardenne, Laurent E**; MONTANARI, C. A.; COSTA, F. B.; EMERY, F. S.; SILVA, C. H. T. P.. Participação em banca de Evandro Pizeta Semighini. Planejamento Racional de Inibidores da Beta-secretase em Mal de Alzheimer. 2013. Tese (Doutorado em Ciências Farmacêuticas) - Universidade de São Paulo.
2. **Dardenne, Laurent Emmanuel**; ARAUJO, A. F. P.; OLIVEIRA, L. C.; BARBOSA, M. A. A.; TREPTOW, W. L.. Participação em banca de Marx Gomes van der Linden. Simulação do Enovelamento de Proteínas com Potenciais de Enterramentos Atômicos Dependentes da Sequência. 2013. Tese (Doutorado em Programa de Pós-Graduação em Biologia Molecular) - Universidade de Brasília.
3. **Dardenne, L.E.**; ABREU, H. N. S.; PINTO, L. F. R.; SILVA, R.. Participação em banca de Amanda de Moraes Maia. Estudo da Estrutura e Função do Marcador de Agressividade Tumoral TWIST1 em Câncer de Mama. 2012. Tese (Doutorado em Oncologia) - Instituto Nacional de Câncer.
4. **Dardenne, L.E.**; DAVILA, A. M. R.; SEIBEL, L. F. B.. Participação em banca de Márcia Mártires Bezerra. Modelagem Conceitual de Bancos de Dados Biológicos. 2012. Tese (Doutorado em Biologia Computacional e Sistemas) - Fundação Oswaldo Cruz.
5. **DARDENNE, L. E.**; Souza, O.N.; Ruiz, D.D.A.; Amorim, H.L.N.A.; Werhli, A.V.. Participação em banca de Karina dos Santos Machado. Seleção Eficiente de Conformações de Receptor Flexível em Simulações de Docagem Molecular. 2011. Tese (Doutorado em Ciência da Computação) - Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul.
6. BISCH, Paulo Mascarelo; **DARDENNE, L. E.**; VonKruger, W.M.A; Braz, G.R.C.; **PASCUTTI, Pedro Geraldo**. Participação em banca de Manuela Leal da Silva. Modelagem molecular de proteínas da bactéria endofítica *Gluconacetobacter diazotrophicus*: Análise em larga escala e de proteínas potencialmente envolvidas na associação planta-bactéria. 2011. Tese (Doutorado em Ciências Biológicas (Biofísica)) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.
7. **MUNDIM, Kléber Carlos**; **Dardenne, Laurent E**; Mundim, M. S. P.; **WERNECK, A. S.**; Martins, J. B. L.. Participação em banca de Adão Lincon Bezerra Montel. Estudo do Mecanismo de Ação e Desenvolvimento de Medicamentos Tripanocidas. 2011. Tese (Doutorado em Química) - Universidade de Brasília.
8. Anteneodo, C.; **DARDENNE, L. E.**; **CAFFARENA, Ernesto Raul**; Pimentel, A.S.; Mattos, M.O.M.. Participação em banca de Teobaldo Ricardo Cuya Guizado. Abordagem Computacional da Estrutura da Albumina Sérica Humana: Efeitos do Heme. 2011. Tese (Doutorado em Física) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.
9. **POLIKARPOV, I.**; **DARDENNE, L. E.**; SKAF, M. S.; GARRAT, R. C.; ANTONINI, S. R. R.. Participação em banca de Alessandro Silva de Nascimento. Estudos Estruturais do Receptor de Hormônio Tireoideano, do Receptor de Mineralocorticóide e do Receptor Ativado por Proliferadores Peroxissomais. 2009. Tese (Doutorado em Física Aplicada - Instituto de Física de São Carlos/USP/SÃO CA) - Universidade de São Paulo.
10. **DARDENNE, L. E.**; **BARBOSA, Hélio José Correa**; **EBECKEN, N. F. F.**; **COUTINHO, A. L. G. A.**. Participação em banca de Leonardo Goliatt da Fonseca. Algoritmos Genéticos Assistedidos por Metamodelos Baseados em Similaridade. 2009. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.

11.

**DARDENNE, L. E.;** SILVA, F. L. B.; SILVA, M. A. A.; RUGGIERO, J. R.; TIERA, M. J.. Participação em banca de Sidney Jurado de Carvalho. Estudo dos Aspectos Eletrostáticos da Interação entre Polieletrólitos e Macróions. 2008. Tese (Doutorado em Biofísica Molecular) - Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho.

12. **DARDENNE, L. E.;** PASCUTTI, Pedro Geraldo; CAFFARENA, Ernesto Raul; SILVA, Renato Simões; CALIRI, A.. Participação em banca de Flávia Paiva Agostini. Mapeamento de Parâmetros do Simulated Annealing Generalizado para o problema do Enovelamento de Proteínas.. 2008. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
13. **DARDENNE, L. E.;** PORTUGAL, Renato; FRAGOSO, Marcelo; Lavor C.C.; Abal G.. Participação em banca de Amanda Castro Oliveira. Simulação de Caminhos Quânticos em Redes Bidimensionais. 2007. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
14. **DARDENNE, L. E.;** Murad M.A.; Moyne C.; Stemmelen D.; GALEÃO, Augusto César Nogueira Rodrigues; Lomba R.F.T.; GUIMARAES, L.; Azevedo R.F.. Participação em banca de Sidarta Araújo de Ima. Multiescala do Acoplamento Eletro-Químico em um Meio Poroso Argiloso com Dependência do PH. 2007. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
15. **DARDENNE, L. E.;** PORTUGAL, Renato; ROSA, Luiz Pingueli; BEVILACQUA, Luiz; FRAGOSO, Marcelo Dutra; DONANGELO, Raul Jose; OLIVEIRA JUNIOR, Ivan dos Santos. Participação em banca de Jean Faber Ferreira de Abreu. Jogos Quânticos a Partir de Hamiltonianos Biofísicos e um Critério de Otimização Sub-Neural da Informação. 2005. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
16. **DARDENNE, L. E.;** THOMPSON, Mark; MIRANDA, Manoel Antolino Mila; ZINGANO, Pauo R Avila. Participação em banca de Luciano Bedin. Movimento de Partículas Carregadas em Fluidos Ionizados: Fundamentos Matemáticos da Teoria de Eletroforese Capilar. 2005. Tese (Doutorado em Matemática Aplicada) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

### Qualificações de Doutorado

1. **DARDENNE, L. E.;** FARIA-PINTO, P.; SANTOS, R. W.. Participação em banca de Vinicius Schmitz Pereira Nunes. Modelagem Comparativa e Dinâmica Molecular da Isoforma 1 da ATP difosfohidrolase de Schistosoma mansoni. 2013. Exame de qualificação (Doutorando em Modelagem Computacional) - Universidade Federal de Juiz de Fora.
2. **DARDENNE, L. E.;** BLEICHER, L.. Participação em banca de Jorge Luís Soares de Pina. Desenvolvimento de novos Algoritmos bio-inspirados para docagem molecular de ligantes peptídicos. 2012. Exame de qualificação (Doutorando em Biologia Computacional e Sistemas) - Fundação Oswaldo Cruz.
3. **Dardenne, L.E.;** Loula , A.; NISSAN, J.. Participação em banca de Jaqueline da Silva Angelo. Algoritmos de Colônia de Formigas para Problemas de Otimização em Dois Níveis. 2012. Exame de qualificação (Doutorando em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
4. **BARBOSA, Hélio José Correia;** NISSAN, J.; Loula , A.; **DARDENNE, L. E.** Participação em banca de Eduardo Krempser da Silva. Uso de Metamodelos na Evolução Diferencial para Problemas de Grande Porte. 2011. Exame de qualificação (Doutorando em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
5. **CAFFARENA, Ernesto Raul;** **DARDENNE, L. E.** Participação em banca de Aline Rossi da Silveira. Estudo computacional da interação entre inibidores derivados de naftoquinonas e a enzima topoisomerase humana. 2010. Exame de qualificação (Doutorando em Biologia Computacional e Sistemas) - Fundação Oswaldo Cruz.
6. **DARDENNE, L. E.;** RAUPP, Fernanda; KRITZ, Maurício; TOLEDO, Elson Magalhães. Participação em banca de Leonardo Golliat da Fonseca. Meta-Modelos em Algoritmos Genéticos para Otimização Estrutural. 2006. Exame de qualificação (Doutorando em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
7. **DARDENNE, L. E.;** VALENTE, Ana Paula; BISCH, Paulo Mascarelo. Participação em banca de Pedro Loureiro. RMN e Estruturas de Proteínas. 2006 - Instituto de biofísica Carlos Chagas Filho.
8. **DARDENNE, L. E.;** KARAM FILHO, José; MURAD, Marcio; NISSAN, J.. Participação em banca de Eduardo Henrique da Rocha Coppoli. O Método de Elementos Finitos (MEF) Aplicados ao Eletromagnetismo e Considerações e Motivações do Uso de um Método sem malha (MESHLESS) para Problemas desta Natureza. 2006. Exame de qualificação (Doutorando em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
9. **DARDENNE, L. E.;** MURAD, Marcio; SILVA, Renato Simões; KARAM, Jose. Participação em banca de Flávio Pietrobon Costa. Acoplamento de escoamento em rede fluvial e subsuperficial: um modelo de elementos finitos estabilizados. 2005. Exame de qualificação (Doutorando em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
10. **DARDENNE, L. E.;** GALEÃO, Augusto César Nogueira Rodrigues; SOUZA, Carlos Emanuel de; RAUPP, Fernanda Maria Pereira. Participação em banca de Jean Felix de Oliveira. Assimilação de Dados em Oceanografia e Meteorologia. 2005. Exame de qualificação (Doutorando em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.

11. **DARDENNE, L. E.;** GALEÃO, Augusto César Nogueira Rodrigues; VALENTIM, Frederic Gerard C; ALMEIDA, Regina Celia Cerqueira de. Participação em banca de Sidarta Araújo de Lima. Modelagem em duas Escalas do Transporte de Solutos Iônicos em Meios Porosos Argilosos. 2005. Exame de qualificação (Doutorando em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
12. **DARDENNE, L. E.;** GALEÃO, Augusto César Rodrigues; OLIVEIRA, Fabiano Saldanha Gomes de; RAUPP, Fernanda. Participação em banca de Anderson Fernandes Pereira dos Santos. Modelagem Numérica de Desempenho do Método de Krilov. 2004. Exame de qualificação (Doutorando em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
13. **DARDENNE, L. E.;** KARAM FILHO, José; FRAGOSO, Marcelo; MALTA, Sandra Mc. Participação em banca de Rosa Luz Medina Aguilar. Escoamentos Saturados em Meios Porosos Elásticos Heterogêneos. 2004. Exame de qualificação (Doutorando em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
14. **DARDENNE, L. E.;** SILVA, Renato Simões; BARBOSA, Hélio José Correa; GIRALDI, Gilson. Participação em banca de Flávia Paiva Agosuini. Folding de Proteínas Aplicado a uma Plataforma de Computação em Grid. 2003. Exame de qualificação (Doutorando em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.
15. **DARDENNE, L. E.;** RAUPP, Fernanda Maria Pereira; SILVA, Renato Simões; GALEÃO, Augusto. Participação em banca de Cleverson A. veronez. Estudo da Interação de Mutantes da Proteasee HIV-1 com Drogas Anti-Virais através de Dinâmica Molecular Aplicada em uma Plataforma de Computação em GRID. 2003. Exame de qualificação (Doutorando em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica.

### Participação em bancas de comissões julgadoras

#### Concurso público

1. **Dardenne, Laurent E;** BERNARDINO, A. M. R.; GONCALVES, J. C. S.. Professor Auxiliar 40 horas/DE - Setor Estágio, Iniciação Científica, Introdução à Pesquisa Científica e Modelagem Molecular. 2013. Faculdade de Farmácia UFRJ.
2. **DARDENNE, L. E.;** STRUCHINER, Cláudio; Franco, G.R.. Concurso Público para provimento de vaga de Especialista em Ciência, Tecnologia, Produção e Inovação em Saúde Pública - Perfil Bioinformática. 2011. Fundação Oswaldo Cruz.
3. **DARDENNE, L. E.;** SANT ANNA, Carlos Maurício R. de. Concurso Público para provimento de vaga com perfil em Bioinformática com Ênfase em Proteômica. 2011. Fundação Oswaldo Cruz.
4. **DARDENNE, L. E.;** SANTANNA, Carlos Maurício R; FRAGA, Carlos Alberto Manssour; Rodrigues, CR; Sa Silva, THA. Concurso Público para provimento de vaga de professor adjunto 40 horas / DE - Bioinformática Aplicada ao Planejamento de Fármacos. 2010. Faculdade de Farmácia UFRJ.

#### Outras participações

1. **DARDENNE, L. E..** Participação no Comitê de Seleção de Pesquisadores Visitantes - FIOCRUZ/RJ. 2007. Fundação Oswaldo Cruz.
2. **DARDENNE, L. E..** Participação no Comitê de Seleção de Pesquisadores Visitantes - FIOCRUZ/RJ. 2006. Fundação Oswaldo Cruz.
3. **DARDENNE, L. E..** Avaliação anual dos trabalhos e linhas de pesquisa do Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas/LASSBio. 2001. Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas Faculdade de Fa.

## Eventos

---

**Participação em eventos, congressos, exposições e feiras**

1. XLI Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular SBBq. The DockThor Portal: a Free Protein-Ligand Docking Server. 2013. (Congresso).
2. 65 Reunião Anual da SBPC. Projeto Dockthor: Um Programa Brasileiro para o Desenho Racional de Fármacos. 2013. (Congresso).
3. II Escola Brasileira de Modelagem Molecular.Strategies for Ab Initio Protein Structure Prediction. 2013. (Simpósio).
4. XLI Annual Meeting of the Brazilian Society for Biochemistry and Molecular Biology (SBBq). Dockthor: Development and Validation of a New Docking Program. 2012. (Congresso).
5. II Latin American Federation of Biophysical Societies Congress/XXXVII Brazilian Biophysical Society Congress. Development and Validation of a New Multi-Solution Receptor-Ligand Docking Program. 2012. (Congresso).
6. XXII International Symposium on Medicinal Chemistry EFMC/ISMC. MOLECULAR MODELING OF IKK2 TARGET: STRUCTURAL AND LIGAND BINDING PROPERTIES STUDIES. 2012. (Congresso).
7. Critical Assessment of Protein Structure Prediction - CASP10. none. 2012. (Congresso).
8. VI Workshop de Avaliação e Acompanhamento do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Fármacos e Medicamentos.Structural and Ligand Binding Properties Studies of the IKK2 Molecular Target. 2012. (Simpósio).
9. Encontro de Física - Integração da Física na América Latina - SBF. Ab Iniiito Protein Structure Prediction using All-Atom and Coarse Grained Models. 2011. (Congresso).
10. Simpósio Interdisciplinar Física+Bioinformática 2011. Dockthor: Development and Validation of a Ligand-Receptor Docking Program. 2011. (Congresso).
11. XVI Simpósio Brasileiro de Química Teórica. Dockthor: Development and Validation of a Ligand-Receptor Docking Program using a Diverse Set of Ligands. 2011. (Congresso).
12. I Escola Brasileira de Modelagem Molecular.Metodologias de Docking Receptor-Ligante. 2011. (Outra).
13. II Reunião Anual de Avaliação do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Fármacos e Medicamentos.Virtual Screening utilizando o programa Dockthor. 2011. (Outra).
14. V BrazMedChem. DockThor: Software for Ligand Flexible Docking Using a Genetic Algorithm and the MMFF94 Force Field. 2010. (Congresso).
15. XVIII International Network of Protein Engineering Centers. GAPF, a Multiple Minima Genetic Algorithm for Ab Initio Protein Structure Prediction. 2009. (Congresso).
16. VII Iberoamerican Congress of Biophysics. AB INITIO PROTEIN STRUCTURE PREDICTION WITH GENETIC ALGORITHMS. 2009. (Congresso).
17. XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica.Algoritmos Genéticos para predição ab initio de estrutura de proteínas. 2009. (Simpósio).
18. Simpósio Interdisciplinar Física+Bioinformática.Ab Iniiito Structure Prediction With Genetic Algorithms. 2009. (Simpósio).
19. XII Encontro Regional da Sociedade Brasileira de Química.Métodos Computacionais Aplicados ao Planejamento de Compostos Bioativos. 2009. (Encontro).
20. XVI Semana Científica Farmacêutica.Metodologias de Docking Receptor-Ligante. 2009. (Outra).
21. 4th Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry. Development of a Docking Methodology Using a Multi\_Solution Genetic Algorithm and a Neural Network. 2008. (Congresso).
22. 4th Internacional Conference of the International Conference of the Brazilian Association for Bioinformatics and Computational Biology - X-Meeting. Molecular Dynamics Simulations of Calmodulin: A Comparative Study of Reaction Field and Particle-Mesh Ewald Electrostatic Treatments. 2008. (Congresso).
23. III Workshop Instituto do Milênio em Inovação e Desenvolvimento de Fármacos e Medicamentos.LLDB - LASSBio Ligand Data Bank. 2008. (Encontro).
24. Structural Bioinformatics Workshop.Cross-Docking oh Highly Flexible Ligands Using a Multi-Solution Algorithm Strategy. 2007. (Simpósio).
25. Second Brazilian Symposium on Bioinformatics - BSB2007.Molecular Dynamics Simulations of Cruzipains 1 and 2 at Different Temperatures. 2007. (Simpósio).
26. XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica.Resolução de Estruturas de Proteínas Utilizando-se Dados de RMN a Parteir de um Algoritmo Genético de Múltiplos Mínimos. 2007. (Simpósio).
27. XXXV SBBq- Reunião Anual da Sociedade Barsileira de Bioquímica e Biologia Molecular. Designing New Bioactive Compounds by using Molecular Modeles Techniques. 2006. (Congresso).
28. 3rd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry.Cross-Docking of Highly Flexible Ligands Using a Multi-Solution Genetic Algorithm Strategy. 2006. (Simpósio).
29. II Workshop Instituto do Milênio em Inovação e Desenvolvimento de Fármacos e Medicamentos.LASSBio Ligand Data Bank. 2006. (Encontro).
30. Biomolecular Simulations. Biomolecular Simulations. 2005. (Congresso).
31. 15th International Biophysics Congress. 15th International Biophysics Congress. 2005. (Congresso).

32. XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica. Cross-Docking of Highly Flexible Ligands using a Multisolution-GSA Docking Method. 2005. (Simpósio).
33. 1st Latin American Protein Society Meeting. 1st Latin American Protein Society Meeting. 2004. (Congresso).
34. 2nd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry. 2nd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry. 2004. (Simpósio).
35. IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica. IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica. 2004. (Encontro).
36. IV Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional. IV Encontro Regional De Matemática Aplicada e Computacional / Workshop sobre Simulação e Análise de Sistemas Complexos. 2004. (Encontro).
37. V Ibero-American Congress of Biophysics. V Ibero-American Congress of Biophysics. 2003. (Congresso).
38. 1st International Conference on Bioinformatics and Computational Biology. 1st International Conference on Bioinformatics and Computational Biology. 2003. (Congresso).
39. Workshop on Molecular Modeling in Biophysics. Workshop on Molecular Modeling in Biophysics. 2002. (Oficina).
40. XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica. XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica. 2001. (Simpósio).
41. IV Biophysics Congress of the Southern Cone. IV Biophysics Congress of the Southern Cone. 2000. (Congresso).
42. XXIII Encontro de Física da Matéria Condensada. XXIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. 2000. (Congresso).
43. Symposium Understanding Protein Electrostatics. Symposium Understanding Protein Electrostatics. 2000. (Simpósio).
44. XIII International Biophysics Congress. XIII International Biophysics Congress. 1999. (Congresso).
45. X Simpósio Brasileiro de Química Teórica. X Simpósio Brasileiro de Química Teórica. 1999. (Simpósio).
46. XXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. XXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. 1998. (Congresso).
47. XX Encontro nacional de Física da Matéria Condensada. XX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. 1997. (Congresso).
48. International Symposium on Protein Condensation. International Symposium on Protein Condensation. 1997. (Simpósio).
49. XIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. XIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. 1996. (Congresso).
50. VIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica. VIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica. 1995. (Simpósio).
51. XVII Encontro nacional de Física da Matéria Condensada. XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. 1994. (Congresso).
52. XVI Encontro nacional de Física da Matéria Condensada. XVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. 1993. (Congresso).
53. XV Encontro nacional de Física da Matéria Condensada. XV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. 1992. (Congresso).

#### **Organização de eventos, congressos, exposições e feiras**

1. **Dardenne, L.E. ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; PASCUTTI, Pedro Geraldo . VI ESCOLA DE MODELAGEM MOLECULAR EM SISTEMAS BIOLÓGICOS. 2012. (Congresso).**
2. **DARDENNE, L. E. ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; PASCUTTI, Pedro Geraldo . V ESCOLA DE MODELAGEM MOLECULAR EM SISTEMAS BIOLÓGICOS. 2010. (Congresso).**
3. **DARDENNE, L. E. ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; PASCUTTI, Pedro Geraldo . IV ESCOLA DE MODELAGEM MOLECULAR EM SISTEMAS BIOLÓGICOS. 2008. (Congresso).**
4. **DARDENNE, L. E. ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; PASCUTTI, Pedro Geraldo . III ESCOLA DE MODELAGEM MOLECULAR EM SISTEMAS BIOLÓGICOS. 2006. (Congresso).**
5. **DARDENNE, L. E. ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; PASCUTTI, Pedro Geraldo . II ESCOLA DE MODELAGEM MOLECULAR EM SISTEMAS BIOLÓGICOS. 2004. (Congresso).**
6. **DARDENNE, L. E. ; CAFFARENA, Ernesto Raul ; PASCUTTI, Pedro Geraldo . I ESCOLA DE MODELAGEM MOLECULAR EM SISTEMAS BIOLÓGICOS. 2002. (Congresso).**

## Orientações

---





## Orientações e supervisões em andamento

### Dissertação de mestrado

1. Karina Baptista dos Santos. Uso de Bibliotecas de Fragmentos para PSP. Início: 2012. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica. (Orientador).
2. Paulo Roberto Teixeira Werdt. Parametrização de Campos de Força Coarse-Grained. Início: 2011. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. (Orientador).

### Tese de doutorado







1.  Isabella Alvim Guedes. Desenvolvimento de Funções Empíricas para Predição de Afinidade Receptor-Ligante. Início: 2011. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. (Orientador).
2.  Gregório Kappaun Rocha. Predição ab initio de estruturas de Proteínas utilizando aminoácidos modificados. Início: 2011. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. (Orientador).
3. Raphael Trevizani Roque de Oliveira. Predição de Estruturas de Proteínas Utilizando Bibliotecas de Fragmentos. Início: 2010. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. (Orientador).



### Iniciação científica

1. Frederico Carlos. DESENVOLVIMENTO DE UM PORTAL PARA O PROGRAMA DE PREDIÇÃO DE ESTRUTURAS DE PROTEÍNAS GAPF. Início: 2012. Iniciação científica (Graduando em modelagem computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. (Orientador).
2. Lucas de Azevedo Vizani. ANÁLISE COMPARATIVA DE PROGRAMAS DE ATRACAMENTO MOLECULAR. Início: 2011 - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. (Orientador).



## Orientações e supervisões concluídas

### Dissertação de mestrado

1.  Diogo Marinho Almeida. Dockthor: Implementação Aprimorada e Validação de um Programa de Docking Receptor-Ligante. 2011. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.
2.  Raphael Trevizani. Biblioteca de Fragmentos para a Predição de Estruturas de Proteínas. 2011. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.
3.  Luiz Phillippe Ribeiro Baptista. Modelagem Molecular da Ribose-5-Fosfato Isomerase de Leishmania Major e de Homo sapiens: Predição de Estruturas e Estudos de Atracamento Molecular. 2011. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.
4.  Isabella Alvim Guedes. Estudo Estrutural e de Propriedades de Reconhecimento Receptor-Ligante dos Alvos IKK-1, IKK-2 e MAPKp38 Utilizando Técnicas de Modelagem Molecular. 2011. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.
5.  Gregório Kappaun Rocha. Implementação e Análise de Modelos de Solvatação para a Predição Ab Initio de Estruturas de Proteínas. 2011. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.
6.  Marx Gomes Van der Linden. Resolução de Estruturas de Proteínas Utilizando-se Dados de RMN a partir de um Algoritmo Genético de Múltiplos Mínimos. 2009. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.

7. Reinaldo Bellini Gonçalves. Desenvolvimento e Validação de novos Métodos de distribuição da População Inicial em Algoritmos Genéticos para o Problema de Docking Proteína-Ligante. 2008. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.
8.  Thais Gaudencio do Rêgo. Construção de Funções Empíricas Utilizando Rede Neural para Determinação de Constantes de Afinidade Receptor-Ligante. 2008. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.
9. Rosemberg de Oliveira Soares. Análise do Impacto do Polimorfismo Genético do Subtipo C do HIV-1 na Interação da Protease Viral com o Inibidor Nelfinavir por Modelagem e Dinâmica Molecular. 2008. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.
10.  Priscila Vanessa Zabala Capriles Goliatt. Técnicas de Bioinformática e Modelagem Computacional Aplicadas ao Estudo do Genoma de Trypanosoma cruzi e de Enzimas Consideradas de Interesse no Tratamento da Doença de Chagas. 2007. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.
11. Fernanda Guedes Oliveira. Estudo do Perfil de Interação de Fosfodiesterase 4 com seus Inibidores. 2005. 120 f. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ. Co-Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.

### Tese de doutorado

1.  Priscila Vanessa Zabala Capriles Goliatt. Desenvolvimento e Implementação de um Modelo Coarse-Grained para Predição de Estruturas de Proteínas. 2011. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.
2.  Fábio Lima Custódio. Algoritmos Genéticos para Predição Ab Initio de Estrutura de Proteínas. 2008. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.
3. Camila Silva de Magalhães. Algoritmos Genéticos para o Problema de Docking Proteína-Ligante. 2006. 202 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.

### Supervisão de pós-doutorado

1. Camila Silva de Magalhães. 2009. Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Laurent Emmanuel Dardenne.

### Iniciação científica

1. Karina Baptista dos Santos. CONSTRUÇÃO DE BIBLIOTECAS DE FRAGMENTOS PARA A PREDIÇÃO DE ESTRUTURAS DE PROTEÍNAS. 2011. Iniciação Científica - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.
2. Cezar Taniguchi Dias Tamer. Metodologias de Superposição de Estruturas de Proteínas. 2008. Iniciação Científica - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.
3. Damásio Antônio Alves Ferreira. DESENVOLVIMENTO DO PORTAL MHOLline: SISTEMA COMPUTACIONAL PARA MODELAGEM COMPARATIVA EM GENÔMICA ESTRUTURAL. 2006. Iniciação Científica - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.

### Orientações de outra natureza

1. Diogo Marinho Almeida. Desenvolvimento de um Ambiente |Computacional para Triagem Virtual de Ligantes em Larga Escala. 2011. Orientação de outra natureza - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Laurent Emmanuel Dardenne.

## Inovação

---

### **Programa de computador registrado**

1. **MAGALHÃES, Camila Silva de ; ALMEIDA, D. M. ; BARBOSA, Hélio José Correa ; Dardenne, Laurent E .** Dockthor. 2012.  
Patente: Programa de Computador. Número do registro: 13318-3, título: "Dockthor" , Instituição de registro:INPI - Instituto Nacional da Propriedade Industrial.
2. **Dardenne, Laurent E ; CUSTÓDIO, Fábio Lima ; BARBOSA, Hélio José Correa .** GAPF - Genetic Algorithm for Protein Folding. 2012.  
Patente: Programa de Computador. Número do registro: 13317-1, título: "GAPF - Genetic Algorithm for Protein Folding" , Instituição de registro:INPI - Instituto Nacional da Propriedade Industrial.
3. **CUSTÓDIO, Fábio Lima ; DARDENNE, L. E. ; DOSSANTOS, K. B. .** Profrager. 2012.  
Patente: Programa de Computador. Número do registro: 13315-4, título: "Profrager" , Instituição de registro:INPI - Instituto Nacional da Propriedade Industrial.

### **Programa de computador sem registro**

1. **Dardenne, L.E. ; DE MAGALHAES, C S ; ALMEIDA, D. M. ; BARBOSA, Hélio José Correa ; Guedes, I.A. ; KREMPSE, E. .** Portal Dockthor. 2013.

## **Educação e Popularização de C & T**

---

### **Apresentações de Trabalho**

1. **Dardenne, L.E. .** Moléculas da Vida (DNA e Proteínas). 2012. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

Página gerada pelo Sistema Currículo Lattes em 21/01/2014 às 21:50:26