



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

COMISSÃO ESPECIAL DE REGIMES DE TRABALHO

Primeira parte

Formulário para o RELATÓRIO ANUAL DE CREDENCIAMENTO, a que se refere ao artigo 26 da Resolução nº 7271/16 e ao Of. Circular CERT nº 01/2017.

Relatório referente ao período de Janeiro a Dezembro do ano de: **2022**.

Departamento: **Departamento de Física e Ciência Interdisciplinar (FCI)**.

Data da Aprovação do Departamento: **01/03/2022 (219ª Sessão Ordinária)**.

Data da Aprovação do CTA ou Congregação: -

COMENTÁRIOS SOBRE O IMPACTO, MÉRITO E A RELEVÂNCIA DAS ATIVIDADES SIMULTÂNEAS DESENVOLVIDAS PELOS DOCENTES PARA A SOCIEDADE.

Durante o ano de 2022, o Departamento teve 12 (doze) docentes com credenciamento CERT autorizados para desenvolver atividades simultâneas ao RDIDP, dos quais 06 (seis) realizaram atividades simultâneas devidamente autorizadas pelo Conselho do Departamento.

A atuação em convênios acadêmicos e de pesquisa, bem como as atividades em parceria com empresas e/ou institutos tecnológicos, foram aprovadas e acompanhadas a partir de relatórios individuais apreciados pelo Conselho do Departamento avaliando o mérito, o impacto e a relevância para a comunidade, a saber:

1. Prof. Dr. ADRIANO DEFINI ANDRICOPULO

Foi dada continuidade ao trabalho de pesquisa entre o IFSC/USP e a “A Iniciativa Medicamentos para Doenças Negligenciadas” (DNDi, sigla em inglês para Drugs for Neglected Diseases initiative), cujo objetivo é a execução do projeto de pesquisa intitulado “Otimização de novas moléculas contra *Trypanosoma cruzi* e *Leishmania spp*”. O projeto envolve pesquisadores da UNICAMP e de diversos laboratórios acadêmicos e de indústrias farmacêuticas do mundo todo. A relevância do projeto se justifica pelo desenvolvimento de candidatos a novos fármacos para o tratamento da doença de Chagas e da leishmaniose, duas das mais importantes doenças tropicais negligenciadas que afetam milhões de indivíduos no mundo. O envolvimento de grupo do docente tem sido fundamental para o desenvolvimento de nossas atividades de pesquisa compreendendo a inserção de alunos de IC e de pós-graduação, bem como de pós-doutorandos.

A falta de tratamentos eficazes torna especialmente importante o delineamento do perfil almejado para o desenvolvimento de novos candidatos a fármacos para ambas as doenças, incluindo: eficácia em todas as áreas endêmicas e para todas as espécies de *Leishmania* e cepas distintas de *T. cruzi*, baixo custo, eficácia em pacientes imunodeprimidos e ausência de efeitos adversos que demandem monitoramento contínuo. Apesar de todas as limitações enfrentadas em 2021 com a pandemia de Covid-19, em 2022 estarão com novos avanços nessa parceria, devendo-se destacar os projetos aprovados que estão dando suporte às atividades de pesquisa na área de doenças tropicais negligenciadas:

1.1 Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo – FAPESP. Processo FAPESP nº 2018/14268-9. Projeto Temático: Descoberta de Fármacos Baseada na Estrutura do Receptor e do Ligante para a Leishmaniose e a Doença de Chagas a partir de Produtos Naturais Bioativos;



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

1.2 Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo – FAPESP. Processo FAPESP nº 15/50655-9. Auxílio à Pesquisa – Parceria para Inovação Tecnológica – PITE: Consortium to Discover New Drugs for the Treatment of Tropical Parasitic Diseases.

2. Prof. Dr. ALBERTO TANNÚS

1.1 Ref.: Processo USP 2017.1.579.76.7 – NIH Grant 1U01EB025153-01

Título: “**Desenvolvimento de um Espectrômetro de Ressonância Magnética Digital (DMRS) para Relaxometria e Imagens de Ressonância Magnética de 19F (MRR, MRI)**” (originalmente de 09/2017, por cinco anos a partir da assinatura, prorrogado por mais um ano até 06/2023)

Atividade realizada SEM percepção de remuneração

1.1.1 Descrição.

Pretende-se estabelecer os fundamentos da colaboração de investigação e do intercâmbio de investigadores no âmbito do Acordo de Cooperação Científica entre o Centro de Imagens e Espectroscopia in vivo por Ressonância Magnética - CIERMag - IFSC - USP e o Center for Magnetic Resonance Research - CMRR - U de M. Todas as linhas de interesse propostas nesta colaboração focam inicialmente em duas aplicações dos conceitos de Ressonância Magnética (MRI), Espectroscopia (MRS) e Relaxometria (MRR) sobre métodos que já são interesses principais em projetos em andamento nesses dois centros. O primeiro é o uso de MRS e MRR no estudo de 19F MRS como candidato para realizar uma medição global de pO2 usando uma instância do Espectrômetro de Ressonância Magnética Digital (DMRS) desenvolvido no CIERMag. O segundo é o desenvolvimento de um DMRS de oito canais de Transmissão e Recepção (Tx / Rx), juntamente com um inovador subsistema SMART SHIM para permitir o uso de um novo método de digitalização denominado STEREO, para realizar experimentos de imagens em um sistema de 1,5 Tesla.

Os resultados preliminares foram obtidos através do desenvolvimento de um espectrômetro completamente funcional, de dois canais de transmissão e dois de recepção (19F e 1H respectivamente), destinados à avaliação dos níveis de oxigenação dos enxertos utilizados nos experimentos e já se encontram em operação, aguardando a caracterização do magneto de 0.5 tesla com o qual irá operar.

Para o segundo projeto, montamos o sistema de oito canais de transmissão e recepção, atualmente operando em 1.5 Tesla (64 MHz) em um magneto de humanos do CMRR em Minneapolis, e que a partir do segundo semestre de 2021 irá operar com o magneto apenas de cabeça de 1.5 Tesla, cuja construção faz parte das atividades de pesquisa do consorcio do qual participamos.

Com a limitação de atividades imposta pela pandemia do covid-19, nenhuma das atividades previstas que envolvem deslocamento até o CMRR pôde ser realizada. Toda a interação com a equipe de Minnesota está sendo realizada remotamente, e cuida neste momento da atualização do espectrometro (DMRS) e respectivo software de controle que ir-a para as versões 1.4.1 do firmware (hardware sintetizado), 3.6 do hardware analógico de RF e controle e versão atual do PyMR e Console de Operação, além dos respectivos subsistemas que acompanham o pacote do software.

Testes recentes demonstraram a versatilidade do DMRS no desenvolvimento de um Método de RM (sequência de pulsos, parametros intrinsecos, painéis (tabs) de interação gráfica e scripts de pós-processamento) caracterizado pela não utilização de Gradientes de Campo Magnético convencionais. Este Método se baseia na utilização de Pulsos Adiabáticos de RF com probes que carregam a possibilidade de codificação espacial da informação, permitindo que se obtenham imagens utilizando apenas pulsos de RF. A descrição do Método, sua implementação no DMRS e resultados obtidos podem ser observados no trabalho **TORRES, E. ; FROELICH, T. ; WANG, P. ; DELABARRE, L. ; MULLEN, M. ; ADRIANY, G. ; PIZETTA, D. C. ; MARTINS, M. J. ; Vidoto, E. L. G. ; TANNÚS, A. ; Michael Garwood . B1-gradient based MRI using Frequency-modulated**



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Rabi Encoded Echoes (FREE). MAGNETIC RESONANCE IN MEDICINE, v. 87 (2), p. 674-685, (2022).

Este trabalho deverá ser um marco de distinção entre as formas de geração de Imagens por RM COM e SEM a utilização de gradientes da campo magnético convencionais, e já disparou a submissão de um novo pedido de auxílio ao NIH com o propósito específico de seu desenvolvimento. Nessa oportunidade poderemos estabelecer novos desafios de desempenho do nosso DMRS com a possibilidade de estender o número de canais de transmissão e recepção para 16. A proposta recebeu críticas dos revisores e será re-submetida em fevereiro de 2023.

1.2 CITESC – MCTI, MS, FINEP, CNPq e PMSC

Título: “**Ciência, Inovação e Tecnologia em Saúde, unidade de São Carlos - CITESC - Laboratório de Imagens por Ressonância Magnética.**” (De 30/01/2014 a 30/07/2017 - renovado até 03/2020)

Atividade realizada SEM percepção de remuneração

1.2.1 Descrição.

Com as mudanças de perspectiva descritas nos relatórios anteriores, ficamos neste momento (2022) sem opção para conduzir as pesquisas e desenvolvimentos que constituíam os objetivos e metas iniciais desse projeto, na planta física do CITESC. Contudo, nossas atividades no CIERMAG – IFSC evoluíram para novas aplicações e novas tecnologias de RM para imagens de humanos e pré-clínicas, com desdobramentos interessantes no desenvolvimento de sistemas que não dependam de gradientes de campo magnético estático, sendo toda a codificação espacial da informação produzida por campos magnéticos de Radiofrequência (RF). Resultados deste desenvolvimento podem ser vistos em nossas publicações (TORRES, E. et al, 2022) e representam um breakthrough no desenvolvimento de sistemas de RM mais baratos, leves e com footprint menor que os da tecnologia atual. Nossa expectativa é que num futuro próximo estejamos trazendo esta tecnologia para o CITESC e com isso dar continuidade às nossas atividades de pesquisa junto a esse centro.

3. Prof. Dr. EDUARDO RIBEIRO DE AZEVÊDO

Atividade desenvolvida em parceria com colaboradores do Cenpes/Petrobras, com apoio da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP).

Título: Uso da ressonância magnética nuclear na elucidação da microestrutura e dinâmica de polímeros orgânicos para avaliação de sua estabilidade e utilização em aplicações na indústria do petróleo.

Valor: R\$ 699.818,48

Vigência: 31/12/2020 a 29/12/2023

4. Prof. Dr. HELLMUT ECKERT

Pelo convênio 1013109 entre USP e a empresa Nippon Electric Glass foram realizadas pesquisa colaborativa e consultoria. Neste convênio, fazem medidas de espectroscopia de RMN para pesquisar correlações entre a estrutura vítrea e as propriedades óticas e mecânicas. As pesquisas investigadas junto com Nippon ajudam no entendimento e fortalecimento mecânico com base da estrutura. Com os rendimentos gerados pagam bolsas para uma aluna de doutorado e um aluno de mestrado. A colaboração ajuda o processo de internacionalização de nossa instituição com o setor industrial. Além disso, o docente faz assessoria de projetos e participa em decisões sobre o financiamento deles como coordenador da Física da FAPESP.

5. Prof. Dr. RAFAEL VICTÓRIO CARVALHO GUIDO



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

1.1 Cellco Biotec

Atividade desenvolvida em parceria com colaboradores da Cellco Biotec.

Título: Desenvolvimento do processo de produção de DNA polimerases com elevada qualidade e processividade.

Nº convênio: 1003663

Valor: R\$ 0,00

Vigência: 16/01/2017 a 15/01/2022

A empresa [Cellco Biotec](#) é uma *startup* que busca sua inserção no mercado nacional com produtos inovadores e de excelência para utilização em laboratórios de pesquisa e diagnóstico. A Cellco Biotec está incubada no Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos – CIBFar onde os pesquisadores da empresa conduzem as atividades experimentais de biologia molecular e bioquímica. Para o estabelecimento desta *startup* em nosso laboratório de pesquisa foi firmado um acordo de colaboração científica (Processo USP: 2020.1.224.76.8) sob a coordenação do docente.

A empresa é uma iniciativa de alunos egressos do curso de Pós-Graduação do IFSC-USP que visam o desenvolvimento de pesquisa e inovação através do estabelecimento de um processo biocatalítico eficiente e padronizado para a produção de biomoléculas em larga escala. Para a plena execução do projeto, a Cellco Biotec contou com o apoio financeiro da FAPESP através da Linha de fomento: Auxílio à Pesquisa - Pesquisa Inovativa em Pequenas Empresas – PIPE. O primeiro projeto PIPE aprovado pela FAPESP ([Processo: 14/50381-3](#)) teve como objetivo principal o desenvolvimento do processo de produção de desoxiribonucleotídeos – dNTPs, empregando a catálise enzimática da reação de redução de ribonucleotídeos – NTPs. O projeto PIPE fase 1 demonstrou a viabilidade técnico-científica da proposta. Devido ao sucesso obtido na primeira fase, uma proposta PIPE – fase 2 foi aprovada ([Processo: 16/24376-8](#)). Na fase 2, foram obtidos dNTPs com pureza superior a 99%, gerando um produto comercialmente atrativo com elevado valor agregado. Além disso, novos estudos estão em andamento para a produção de uma série de dNTPs e análogos marcados como reagentes inovadores e com crescente demanda em pesquisa.

Uma segunda proposta da Cellco para financiamento na linha PIPE-FAPESP ([Processo: 16/20162-3](#)) teve como objetivo o desenvolvimento do processo de produção de DNA polimerases com elevada qualidade e processividade. Os resultados almejados foram alcançados com sucesso e uma nova proposta de pesquisa foi aprovada no programa PIPE – Fase 2 ([Processo: 17/12334-1](#)). Nesta segunda fase foi obtida a enzima íntegra e de modo reprodutível, validada pelos ensaios bioquímicos e com produção em escala piloto.

Em 2020, uma terceira proposta Cellco foi aprovada na linha PIPE ([Processo: 20/06637-4](#)). Esta proposta visa o desenvolvimento de kits para detecção de COVID-19 pelo método de RT-PCR multiplex em tempo real e colorimétrico por RT-LAMP. É importante mencionar que a pesquisadora responsável por esta proposta, Dra. Naiara Torres, foi aluna de doutorado pela supervisão do docente (defesa realizada em maio/2020) que uniu os conhecimentos e resultados obtidos durante o doutoramento nesta proposta inovadora e pertinente para a atual situação nacional frente a pandemia de COVID-19.

Em 2021 a Cellco mudou-se integralmente para uma sede própria em São Carlos na qual seus funcionários realizam pesquisa e produzem os insumos biotecnológicos que são distribuídos para clientes de todo o Brasil.

Vale ressaltar que a presença de uma empresa no ambiente acadêmico ofereceu aos alunos de graduação e pós-graduação do nosso laboratório a oportunidade de vivenciarem a experiência de pesquisa científica com visão empresarial. Além disso, a presença de uma *startup* dentro da Universidade criou um ambiente favorável para a inovação e inspirou os alunos mais jovens a enveredarem para o mundo do empreendedorismo.



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Não houve percepção de remuneração nesta atividade de pesquisa.

1.2 Medicines for Malaria Venture (MMV)

Em 2022 foi continuada a parceria com a organização não governamental *Medicine for Malaria Ventures* (MMV). Sua missão é reduzir a incidência e tratar a malária em países endêmicos, através da descoberta, desenvolvimento e acessibilidade de novos medicamentos eficazes. Este projeto está dividido em duas frentes: i) no projeto PITE-FAPESP visam o desenvolvimento de moléculas para obtenção de um candidato para estudos clínicos; e, ii) no projeto Isolados de Campo visam avaliação de novos inibidores em ensaio *ex vivo* contra isolados de *P. falciparum* e *P. vivax* em colaboração com o CEPEM.

Na segunda frente (Isolados de Campo) houve percepção de remuneração para as atividades de consultoria científica, avaliação de resultados e elaboração de relatórios técnicos.

1.2.1 PITE-FAPESP

Atividade desenvolvida em parceria com colaboradores da MMV, UNICAMP e FAPESP.

Título: Consórcio FAPESP/MMV/DNDI/UNICAMP/USP para descobrir novos medicamentos para o tratamento de doenças parasitárias tropicais

Valor: US\$ 25.000,00

Vigência: 16/01/2017 a 31/12/2024

O projeto PITE-FAPESP conta com apoio financeiro do Programa de Apoio à Pesquisa em Parceria para Inovação Tecnológica (PITE-FAPESP). O título do projeto é Consórcio FAPESP/MMV/DNDI/UNICAMP/USP para descobrir novos medicamentos para o tratamento de doenças parasitárias tropicais - Processo:15/50655-9) e a equipe de trabalho do é composta por pesquisadores do Instituto de Química da UNICAMP, coordenados pelo Prof. Luiz Carlos Dias (pesquisador responsável), e do IFSC/USP, sob coordenação do docente (pesquisador principal).

No projeto PITE-FAPESP foram desenvolvidas moléculas para obtenção de um candidato clínicos. Em 2022, avanços significativos foram obtidos e incluíram a validação de novos compostos como candidatos ao desenvolvimento de compostos líderes para a malária. Os trabalhos incluíram estudos de relação estrutura-atividade em três séries de compostos. Entre eles destacam-se os compostos apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Resumo das propriedades físico-químicas e biológicas dos novos candidatos.

	MMV1841740	MMV1832207	MMV1812065
Molecular weight - g/mol	385	314	405
LogD	2.8	0.3	1.5
HLM (Clint μL/min/mg)	<4	< 3.5	35
Rat-heps - Clint μL/min/10e6 cells	2	1.8	4.46
Kin Sol PBS -(pH = 7.4) μM	7	194	186
Pf3D7 SybrGreen - IC₅₀ - μM	0.15	0.06	0.53
LDH-PfNF54 -72 h - IC₅₀ - μM	0.12	0.25	0.85
LDH-PfDd2 -72 h - IC₅₀ - μM	0.24	0.058	1.1



Toxicity-Hep G2 cells 48 h/72 h IC₅₀ - μM	48/3.5	25	25
hERG-IC₅₀ μM	9.7	No hERG risk: Determined for other analogs	8.05
Rate of killing -PRR	FAST	no XR (<i>Sanger</i>)	Faster than CQ
MXR	No XR	No XR	no XR

1.2.2 Isolados de Campo

Atividade desenvolvida em parceria com colaboradores da MMV. Título: Brazilian field isolates project

Valor: US\$ 40.000,00

Vigência: 16/01/2017 a 31/12/2024

No projeto para avaliação de novos inibidores em ensaio *ex vivo* contra isolados de *P. falciparum* e *P. vivax* três campanhas em Porto Velho foram conduzidas em 2022 (Comitê de Ética do Centro de Pesquisa em Medicina Tropical-CEPEM-Rondônia - CAAE 61442416.7.0000.0011). Devido à alta incidência da malária na região norte do país, foi possível incluir um número significativo de pacientes em nossos estudos (n = 42).

Um dado interessante que foi observado nas diversas campanhas conduzidas na região endêmica é que a potência do antimalárico padrão, cloroquina, utilizado como controle positivo nos ensaios, tem diminuído ao longo do tempo (Figura 1). Esse fármaco é o tratamento padrão para os casos identificados na região. Esses dados sugerem que a população de parasitas endêmicos da região norte do Brasil estão se tornando resistente ao tratamento padrão. Portanto, se essa tendência se confirmar, nos próximos anos teremos um aumento significativo no número de casos de malária resistente no Brasil devido a perda de eficácia do medicamento padrão para o tratamento.

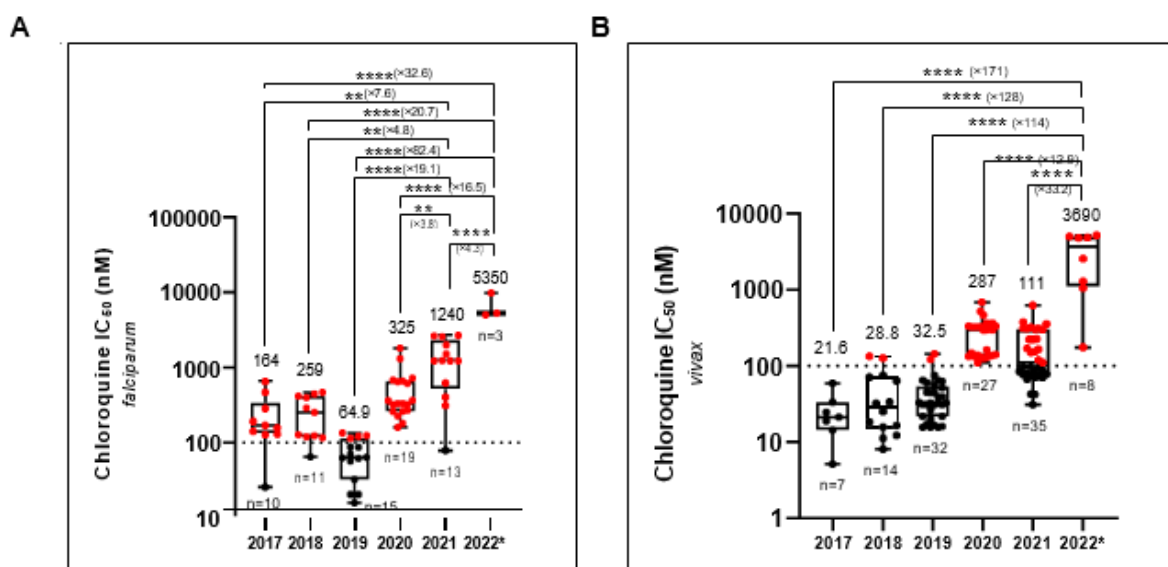


Figura 1. Valores de IC₅₀ da cloroquina em amostras de *P. falciparum* (A) e *P. vivax* (B) isoladas de pacientes na região endêmica de Porto Velho – RO (*dados parciais).

1.3 Atomwise



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Atividade desenvolvida em parceria com colaboradores da Atomwise. Título: Discovery of new antiviral candidates

Valor: US\$ 0,00

Vigência: 16/01/2021 a 31/12/2022

Atomwise é uma empresa americana estabelecida em São Francisco que está revolucionando a forma como os fármacos são descobertos com o auxílio de métodos de inteligência artificial (AI). Atomwise desenvolveu e otimizou métodos de aprendizado de máquinas para a descoberta de fármacos baseados em estrutura que visam a identificação de inibidores como a candidatos a fármacos para estudos pré-clínicos. A tecnologia desenvolvida, AtomNet®, foi usada na descoberta de novos alvos moleculares inovadores. Atualmente, a empresa investiga mais de 600 alvos moleculares em 775 colaborações, abrangendo mais de 250 parceiros em todo o mundo. Um desses parceiros é o laboratório do docente no Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos (CIBFar/CEPID).

Neste projeto colaborativo, Atomwise conduziu a triagem virtual de uma coleção de milhões de compostos no sítio de ligação dos domínios helicase e protease da enzima NS2B-NS3 do vírus da febre amarela e no sítio de ligação da NS3 Helicase do vírus da Zika usando a tecnologia patenteada AtomNet®. Os compostos que apresentaram maior pontuação foram agrupados e selecionados pela Atomwise, gerando um subconjunto final de 86 compostos candidatos a inibidores. Os compostos foram recebidos em dezembro/2020 e a avaliação da atividade inibitória contra as enzimas avaliadas nos ensaios padronizados indicaram que eles foram inibidores de baixa potência ($IC_{50} > 50 \mu M$). Embora estivesse prevista uma nova rodada de avaliação computacional para seleção de novos candidatos a inibidores das enzimas alvo, os trabalhos não foram descontinuados em 2022.

Não houve percepção de remuneração nestas atividades de pesquisa.

1.4 EMS-Vita Nova

Atividade desenvolvida em parceria com colaboradores da EMV-Vita Nova. Título: Modelagem *in silico* de candidatos a fármacos

Valor: R\$ 21.000,00

Vigência: 05/08/2020 a 04/08/2025

A indústria de farmacêutica caracteriza-se pela constante necessidade de inovações para atender a esse mercado de notável crescimento nos últimos anos. Dentre os fatores relevantes para a competitividade das empresas farmacêuticas, destaca-se a importância de novos produtos. Deste modo, a inovação tecnológica torna-se um fator competitivo importante para a indústria farmacêutica, justificando assim os elevados investimentos em pesquisa e desenvolvimento.

A EMS, com o desafio constante de fabricar produtos de qualidade, eficazes, seguros, competitivos e reconhecidos nos mercados nacional e internacional, realiza pesquisa e desenvolvimento, fato evidenciado pelo grande número de patentes depositadas, além de uma ampla gama de projetos, incluindo estudos clínicos e *in vitro*, bem como o constante lançamento de novos produtos. Neste contexto, os estudos dos processos de reconhecimento molecular em sistemas biológicos assumem grande importância no planejamento de novos fármacos, pois constituem as bases fundamentais para a melhor compreensão das propriedades farmacodinâmicas (e.g., potência, afinidade e seletividade) dos candidatos a fármacos por seus receptores alvo. Além disso, o conhecimento sobre o alvo molecular e mecanismo de ação dos compostos bioativos podem ser úteis para a otimização de propriedades farmacocinéticas. Nesse cenário, a química medicinal desempenha função central para a descoberta e desenvolvimento de novas moléculas com atividade biológica.

O objetivo desta prestação de serviço consistiu na avaliação *in silico* de candidatos a fármaco oftalmológico de interesse do IVN/ EMS com base em modelos moleculares de interação. Os



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

métodos empregados incluíram metodologias específicas para a identificação de moléculas em base de dados, construção de modelos de interação e avaliação experimental da propriedade biológica de moléculas selecionadas (Figura 2).

Houve percepção de remuneração para as atividades de consultoria científica, avaliação de resultados e elaboração de relatórios técnicos.

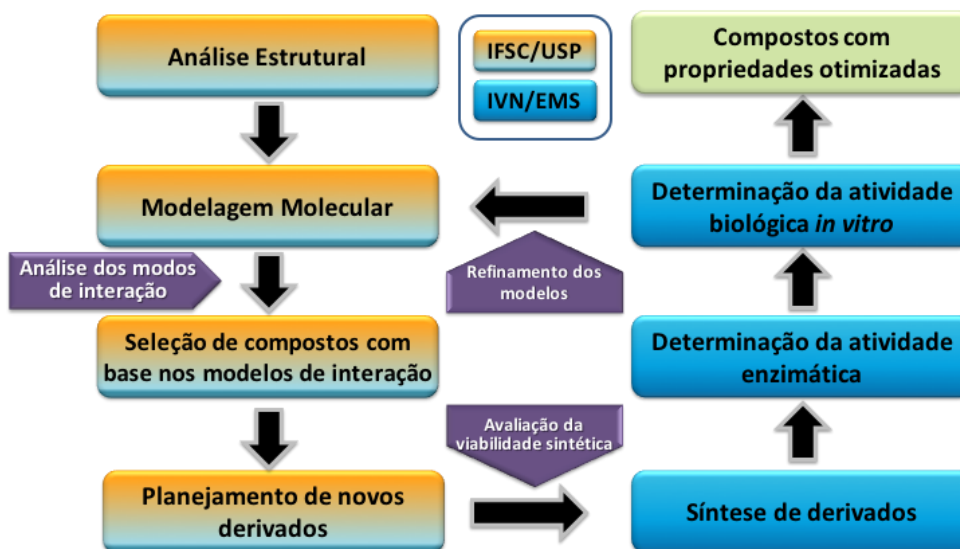


Figura 2. Esquema representativo das estratégias de modelagem molecular e experimentais para a seleção de moléculas de interesse da IVN/EMS.

1.5 *Drugs for Neglected Diseases initiative (DNDi)*

Atividade desenvolvida em parceria com colaboradores da DNDi.

Título: Descoberta de novos inibidores de PLpro como candidatos a fármacos para covid- 19

Valor: R\$ 108.000,00

Vigência: 11/10/2021 a 10/10/2022

A iniciativa Medicamentos para Doenças Negligenciadas (DNDi) é uma organização sem fins lucrativos de pesquisa e desenvolvimento (P&D) de medicamentos para doenças negligenciadas. Orientada pelas necessidades dos pacientes, a DNDi trabalha de forma colaborativa para desenvolver novas ferramentas de tratamento para doenças como a leishmaniose, a doença de Chagas, a doença do sono (Tripanossomíase Humana Africana - THA), a malária, o HIV pediátrico, e determinadas infecções por helmintos.

Atuando de acordo com o interesse público e para responder às necessidades dos pacientes, a DNDi preenche as lacunas existentes em P&D de medicamentos essenciais para estas doenças com projetos em colaboração com a comunidade científica internacional, o setor público, a indústria farmacêutica, e outros parceiros relevantes.

O esforço para combater o novo coronavírus levou grande parte dos serviços de saúde de vários países a deixar em segundo plano a luta contra outras doenças infecciosas e crônicas, reduzindo os atendimentos ambulatoriais, o acompanhamento de pacientes e as campanhas de vacinação. Neste contexto, boa parte dos investimentos em pesquisa ficou concentrada em desenvolver novas ferramentas para diagnosticar, prevenir e tratar a covid-19. Diante desse cenário e com os avanços obtidos na elucidação da estrutura 3D de alvos moleculares importantes do SARS-CoV-2, bem como a padronização de bioensaios para a descoberta de inibidores, em 2021 a DNDi passou a



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

investir na descoberta de novos compostos como candidatos a fármacos para a covid-19.

Neste projeto em colaboração a DNDi financiou uma bolsa de pós-doc em nosso laboratório. O pós-doc contrato foi responsável pelos ensaios de inibição enzimática, cristalização, coleta de dados e determinação estrutural de complexos com os principais alvos moleculares do SARS-CoV-2. Em 2022, avançaram nos estudos de relação-estrutura atividade de uma série promissora de inibidores da enzima Papain-Like protease (PLpro) de SARS-CoV-2 (Tabela 2). Os compostos apresentaram potencial de desenvolvimento promissor e continuam sob investigação. Além disso, estudos de co-cristalização e *soaking* estão em andamento para a determinação do modo de ligação dos inibidores de PLpro. Esses resultados serão úteis para o planejamento de novos inibidores derivados dos hits iniciais.

Não houve percepção de remuneração nesta atividade de pesquisa.

Tabela 2. Atividade biológicas de inibidores da PLpro desenvolvidos em parceria com a DNDi.

	DNDI0004 039871	DNDI000 3976408	DNDI000 3976409	DNDI0003976407	DNDI0004012995
Batch ID	PCTCG02 -1172	PCTCG0 2-1096	PCTCG0 2-1101	PCTCG02-1094	PCTCG02-1108
Target ID	T-758	T-759	T-760	T-761	T-762
PLpro IC ₅₀ (μ M)	0.23	>20	9.88	9.51	>20
SARS-CoV-2 EC ₅₀ (μ M) (max inhib.)	>50% (3.7%)	>50 (13%)	>50 (20%)	>50 (17%)	>50 (<1%)
Vero tox CC ₅₀ (μ M)	>50	>50	>50	>50	>50

6. Prof. Dr. TITO JOSE BONAGAMBA

Projetos desenvolvidos em 2022

As atividades simultâneas apresentadas neste item estão associadas àquelas desenvolvidas no Grupo que coordeno no IFSC/USP. Este grupo é denominado Laboratório de Espectroscopia de Alta Resolução por Ressonância Magnética Nuclear, conhecido pelo acrônimo LEAR.

Visite a página do LEAR: <https://ifsc-lear.weebly.com/>

Todas as atividades apresentadas neste item estão associadas com as linhas de pesquisa básica e aplicada tradicionais do LEAR, envolvendo alunos de iniciação científica e pós-graduação, bem como colaboradores em nível de pós-doutorado. Essas atividades oferecem oportunidades de colaboração com pesquisadores de várias instituições e empresas. Essas colaborações envolvem projetos de pesquisa de alto grau de complexidade e abrem perspectivas de emprego aos nossos egressos, tanto na Academia como em Indústrias/Empresas. Como exemplo de empregos em Indústrias/Empresas, temos estudantes (ES) ou egressos (EG) atuando no Cenpes/Petrobras (EG/Dr.), Engemasa (EG/Dr.), FIT (ES/Mestrando), SEEK (EG/Dr.) e Samsung (EG/Mestre). Enquanto a Schlumberger manteve seu centro de pesquisa no Brasil, houve um egresso (EG/Dr.) atuando na empresa, com sucesso. No momento, existem também dois egressos (EG/Dr.) atuando no Weizmann Institute of Science – Israel (sendo um contratado como Senior Intern e outro como pós-doc) e outros dois na KU Leuven – Bélgica (sendo um contratado para atuar em pesquisa e desenvolvimento e outro como pós-doc).

Atividade desenvolvida em parceria com colaboradores do Cenpes/Petrobras, com apoio da



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP).

Título: Estudo de Rochas Reservatório por Ressonância Magnética Nuclear - 1.

Valor: R\$ 1.798.567,79

Vigência: 01/12/2020 a 30/03/2023 (sendo estendido para 25/11/2023)

Resumo:

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) tem sido amplamente empregada na área de Ciência e Engenharia do Petróleo - Meios Porosos, tanto no ambiente de laboratório quanto no de perfilagem. Nos dois casos, a RMN continua em pleno desenvolvimento, com o objetivo de oferecer dados mais precisos sobre a produtividade de Poços de Petróleo. No caso de perfilagem, a RMN se destaca como uma das principais ferramentas empregadas na determinação da viabilidade econômica de um poço de petróleo, devido à confiabilidade das medidas de permeabilidade do reservatório em análise que ela fornece.

O LEAR tem se dedicado ao desenvolvimento da RMN em Ciência do Petróleo - Meios Porosos nessas duas frentes, procurando sempre se aprimorar, sob aspectos teóricos, experimentais, instrumentais e computacionais da técnica. Além disso, tem buscado correlacionar os dados de RMN com aqueles obtidos com outras técnicas, principalmente microtomografia tridimensional por Raios-X (microCT) e petrofísica básica.

Hoje, com os equipamentos e as técnicas que foram aprimoradas ou desenvolvidas, é possível prover dados consistentes associados com a permeabilidade de rochas reservatório. Porém, até recentemente, os estudos se limitavam ao emprego de equipamentos de RMN que utilizam magnetos convencionais. Para estudar rochas reservatório em condições semelhantes às empregadas pelas empresas prestadoras de serviços de petróleo, desenvolveram, em parceria com colaboradores da KU Leuven (Bélgica), liderados pelo Prof. Dimitrios Sakellariou, um magneto unilateral (single-sided) com especificações semelhantes às daqueles que são empregados em ferramentas de perfilagem. Este novo magneto, utilizado com os equipamentos de RMN que já dispõem, está permitindo um melhor entendimento das medidas de RMN que são realizadas em condições reservatório e perfilagem, como será descrito a seguir.

O ambiente de perfilagem impõe uma série de fatores que podem impactar na qualidade do dado adquirido em poço. Dentre os quais, os mais comuns são ruídos ambientais, baixa sensibilidade, inhomogeneidade/gradiente de campo magnético, temperatura e pressão do reservatório, tipo de fluido original e quantidade/tipo de fluido de invasão.

Entretanto, uma outra classe de fatores provenientes da aquisição de dados com a ferramenta de perfilagem em movimento impactam negativamente na qualidade do dado. A movimentação da ferramenta tende a alterar as medidas obtidas por RMN de maneira artificial, sendo este efeito especialmente relevante nas aquisições em condições de *Logging While Drilling* (LWD), pois, além da movimentação longitudinal, encontra-se presente a vibração da ferramenta devida à rotação da coluna de perfuração e ao atrito da broca com a rocha. Por essa razão, desenvolveram um equipamento de RMN associado ao magneto unilateral para estudar os efeitos no sinal adquirido sob a movimentação controlada da amostra, emulando uma aquisição LWD. Estamos, assim, através de modelagem e processamento desses dados, tornando a qualidade da informação adquirida em LWD similar à obtida na perfilagem a cabo, onde não ocorre a movimentação da ferramenta de perfilagem de RMN.

De forma complementar, foram introduzidos neste projeto duas novas atividades: Acustografia e Manufatura de Meios Porosos Artificiais.

A Acustografia consiste no emprego de pulsos acústicos para a obtenção de propriedades petrofísicas e viscoelásticas de rochas reservatório. Com esta técnica, pulsos de ultrassom de alta frequência (1-10 MHz) são aplicados em meios porosos. Como resposta, é obtido um sinal de baixa frequência (Hz-KHz), que apresenta forte dependência com a porosidade e a viscoelasticidade da rocha. Tendo sucesso com o emprego desta metodologia, haverá mais uma técnica experimental



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

para o estudo de meios porosos, correlacionada com dados de RMN. Esta parte do projeto está sendo desenvolvida em colaboração com o Prof. Antonio Adilton Oliveira Carneiro (FFCLRP/USP).

No caso da Manufatura de Meios Porosos Artificiais, estão sendo confeccionados meios porosos padrão que mimetizam rochas reais, que estão sendo empregados para o desenvolvimento de novas metodologias de RMN e Acustografia. Esta parte do projeto está sendo desenvolvida em colaboração com o Prof. Carlos Alberto Fortulan (EESC/USP).

Adicionalmente, fazem parceria de longa data na área de estudos geológicos/geofísicos de rochas reservatório, com o Prof. Ricardo Ivan Ferreira da Trindade (IAG/USP), que já resultou em vários estudos importantes publicados em revistas indexadas da área.

Atividade desenvolvida em parceria com a Empresa Fine Instrument Technology - FIT

Título: Desenvolvimento de equipamento de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) dedicado à análise de materiais em baixo campo e no domínio do tempo.

Valor: Esse projeto não envolve recursos

Vigência: 02/02/2022 a 31/07/2023

Resumo: Desenvolver um Equipamento de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) dedicado à análise de materiais em baixo campo e no domínio do tempo, com destaque para Meios Porosos, através de medidas de tempos de relaxação e coeficientes de difusão.

Atividade desenvolvida em parceria com colaboradores da International Business Machines Corporation, uma corporação da New York IBM, em conjunto com a IBM Brasil – Indústria, Máquinas e Serviços Ltda.

Título: Análise Computacional de Dados Físicos de Rochas Digitais.

Valor: Esse projeto não envolveu recursos.

Vigência: 20/09/2017 a 01/09/2022 (encerrado)

Resumo: Neste projeto, foram desenvolvidas e aplicadas técnicas físico-computacionais dedicadas à análise computacional de rochas digitais obtidas a partir de microtomografia tridimensional por Raios-X, com o intuito de estimar a permeabilidade de rochas reservatório de petróleo.

COMENTÁRIOS SOBRE O IMPACTO DAS ATIVIDADES SIMULTÂNEAS DESENVOLVIDAS PELOS DOCENTES NO PLANO DE METAS DO DEPARTAMENTO.

A participação dos docentes credenciados e em exercício de atividades simultâneas, junto à carga didática do FCI-IFSC não acarretaram diferenciação nos créditos/disciplinas ministrados em cada um dos semestres letivos, uma vez que todos, ministram disciplinas de **Graduação e/ou Pós-Graduação**, mantendo-se as atribuições normais do RDIDP. Os convênios e contratos contribuíram para que alunos de iniciação científica e de pós-graduação participassem das atividades desenvolvidas em parceria com indústrias e/ou empresas e, em alguns casos, foram obtidas bolsas acadêmicas remuneradas.

Na **Pesquisa**, o FCI mostra-se forte e consolidado ao longo dos anos, uma vez que as atividades simultâneas estão diretamente relacionadas aos projetos de pesquisa desenvolvidos no IFSC, em especial no Departamento de Física e Ciência Interdisciplinar.

As parcerias e convênios realizados têm ajudado na captação de recursos financeiros, na manutenção de infraestrutura e na criação de novas linhas de pesquisa em consonância com a demanda social; além das parcerias tecnológicas em áreas estratégicas que aproximam a universidade, empresas e a sociedade.



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Na extensão, a parceria com indústria e empresa tem sido satisfatória e nosso departamento, o qual é reconhecido nacional e internacionalmente pelas suas características multidisciplinares, tem apoiado de forma positiva propostas desta natureza.

A realização de prestação de serviços, consultorias e assessorias técnico-científicas, por parte dos seus docentes, representa um excelente modo de retorno à sociedade da ciência e da tecnologia aqui desenvolvidas.

Outro ponto importante a ser ressaltado é que o acompanhamento departamental das atividades simultâneas tem garantido que as atribuições do RDIDP dos docentes credenciados e em exercício simultâneo sejam realizadas de forma plena e satisfatória.

COMENTÁRIOS SOBRE O IMPACTO DAS ATIVIDADES SIMULTÂNEAS DESENVOLVIDAS PELOS DOCENTES NO PLANO DE METAS DA UNIDADE.

O Departamento de Física e Ciência Interdisciplinar (FCI) vem atuando em perfeita consonância com as metas do Instituto de Física de São Carlos (IFSC). Portanto, o acompanhamento realizado pelo Departamento das atividades simultâneas tem garantido que as atribuições do RDIDP de Ensino, Pesquisa e Extensão dos docentes credenciados e em exercício simultâneo sejam realizadas de forma plena e satisfatória. Portanto, as atividades simultâneas representam um excelente modo de retorno à sociedade, da ciência e da tecnologia aqui desenvolvidas.

COMENTÁRIOS SOBRE O DESEMPENHO INDIVIDUAL DOS DOCENTES NAS ATIVIDADES DE RDIDP (enumerando inclusive as medidas adotadas nos casos de desempenho insatisfatório).

Prof. Dr. ADRIANO DEFINI ANDRICOPULO <http://lattes.cnpq.br/5598322661148873>*

1 ATIVIDADES DE PESQUISA

1.1 Produção científica

ARTIGO DE JORNAL - NACIONAL

ANDRICOPULO, Adriano Defini. Nobel de Química 2022: a arte do clique para construir moléculas inovadoras. Portal USP, São Carlos, 24 outubro 2022. online. Publicação: Portal da USP, de 24 outubro 2022.

ARTIGO DE JORNAL-DEP/ENTR - NACIONAL

MORAES, Josué de; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Especialistas alertam para a necessidade de buscar novos tratamentos para verminoses. [Depoimento a André Julião]. Agência FAPESP, São Paulo, 01 jul. 2022. online.

ARTIGO DE PERIÓDICO - INTERNACIONAL

CHIPOLINE, Ingrid C.; BRASIL, Beatrice F. A; S. NETO, José S.; VALLI, Marília; KROGH, Renata; CENCI, Arthur R.; TEIXEIRA, Kerolain F.; ZAPP, Eduardo; BRONDANI, Daniela; FERREIRA, Leonardo L.G.; ANDRICOPULO, Adriano Defini; OLIVEIRA, Aldo S.; NASCIMENTO, Vanessa. Synthesis and investigation of the trypanocidal potential of novel 1,2,3-triazole-selenide hybrids. European Journal of Medicinal Chemistry, Weinheim, v. 243, p. 114687-1-114687-9, Sept. 2022. Fator de Impacto: 7,088



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; MORAES, Josué de; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Approaches to advance drug discovery for neglected tropical diseases. *Drug Discovery Today*, London, v. 27, n. 8, p. 2278-2287, Aug. 2022.

Fator de Impacto: 8,369

MACHADO, Valkiria; CENCI, Arthur R.; TEIXEIRA, Kerolain F.; SENS, Larissa; TIZZIANI, Tiago; NUNES, Ricardo J.; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; YUNES, Rosendo A.; SANDJO, Louis P.; ANDRICOPULO, Adriano Defini; OLIVEIRA, Aldo

S. Pyrazolines as potential anti-Alzheimer's agents: DFT, molecular docking, enzyme inhibition and pharmacokinetic studies. *RSC Medicinal Chemistry*, Cambridge, v. 13, n. 12, p. 1644-1656 + supplementary information, Dec. 2022. Fator de Impacto: 3,470

OLIVEIRA, Aldo Sena de; VALLI, Marília; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes Julia M Souza; SOUZA, Julia Medeiros; ANDRICOPULO, Renata Krogh; MEIER, Lidiane; ABREU, Heitor R.; VOLTOLINI, Bruna G.; LLANES, Luana C.; NUNES, Ricardo José; BRAGA, Antonio L.; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Novel trypanocidal thiophen-chalcone cruzain inhibitors: structure- and ligand-based studies. *Future Medicinal Chemistry*, London, v. 14, n. 11, p. 795-808, June 2022.

Fator de Impacto: 4,767

PAULI, Ivani; REZENDE JUNIOR, Celso de Oliveira; SLAFER, Brian W.; DESSOY, Marco A.; SOUZA, Mariana Laureano de; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; ADJANOHUN, Abraham L. M.; FERREIRA, Rafaela S.; MAGALHÃES, Luma

Godoy; ANDRICOPULO, Renata Krogh; DUARTE, Simone Michelan; DEL PINTOR, Ricardo Vaz; SILVA, Fernando B. R. da; CRUZ, Fabio C.; DIAS, Luiz C.; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Multiparameter optimization of Trypanocidal cruzain inhibitors with in vivo activity and favorable pharmacokinetics. *Frontiers in Pharmacology*, Lausanne, v. 12, p. 774069-1-774069-21 + supplementary material, Jan. 2022.

Fator de Impacto: 5,988

ROQUINI, Daniel B.; SILVA, Gabriel L.; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; ANDRICOPULO, Adriano Defini; WILAIRATANA, Polrat; MORAES, Josué de. Susceptibility of *Angiostrongylus cantonensis* larvae to anthelmintic drugs. *Frontiers in Pharmacology*, Lausanne, v. 13, p. 901459-1-901459-9, June 2022.

Fator de Impacto: 5,988

TELES, Henrique Rodrigues; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; VALLI, Marília; COELHO, Fernando; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Hierarchical clustering and target-independent QSAR for antileishmanial oxazole and oxadiazole derivatives. *International Journal of Molecular Sciences*, Basel, v. 23, n. 16, p.8898-1-8898-16, Aug. 2022.

Fator de Impacto: 6,208

TELES, Henrique Rodrigues; VALLI, Marília; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Molecular modeling, virtual screening, and molecular dynamics for *Leishmania infantum* methionyl-tRNA synthetase. *Journal of Physical Chemistry B*, Washington, DC, v. 126, n. 51, p. 10834-10843, Dec. 2022. Fator de Impacto: 3,466

VALLI, Marília; SOUZA, Julia Medeiros; CHELUCCI, Rafael Consolin; BIASETTO, Carolina Rabal; ARAUJO, Angela Regina; BOLZANI, Vanderlan da Silva; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Identification of natural cytochalasins as leads for neglected tropical diseases drug discovery. *PLOS One*, San Francisco, v. 17, n. 10, p. e0275002-1-e0275002-13, Oct. 2022.

Fator de Impacto: 3,752

ARTIGO DE PERIÓDICO-CARTA/EDITORIAL - INTERNACIONAL

FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; ANDRICOPULO, Adriano Defini.

Chemoinformatics approaches to structure- and ligand-based drug design, volume II. [Editorial]. *Frontiers in Pharmacology*, Lausanne, v. 13, p. 945747-1-945747-3, June 2022.



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Fator de Impacto: 5,988

CURADORIA - NACIONAL

CRUZ, Angela Kaysel (cur); ZAMBONI, Dario Simões (cur); ANDRICOPULO, Adriano Defini (cur). São Paulo School of Advanced Science on pathogenic trypanosomatids: from basic biology to pathogenesis and new therapies. Ribeirão Preto: Universidade de São Paulo - USP, 2022.

VIEIRA, Paulo Cezar; ANDRICOPULO, Adriano Defini; BERTOTTI, Mauro; ARTAXO, Paulo; QUEIROZ, Salete Linhares. Congresso Latinoamericano de Química - CLAQ, 35/ Congresso Brasileiro de Química - CBQ, 61. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Química - ABQ, 2022.

EDITOR DE PERIÓDICO - INTERNACIONAL

ZHOU, Jia (ed); ANDRICOPULO, Adriano Defini (ed). Current Topics in Medicinal Chemistry. Sharjah: Bentham Science, 2022. .

Fator de Impacto: 3,570

EDITOR DE PERIÓDICO - NACIONAL

FERREIRA, Elizabeth Igne (ed); RANGEL-YAGUI, Carlota de Oliveira (ed); SERRA, Cristina Helena dos Reis (ed); FINARDI FILHO, Flavio (ed); MARTINS, Joilson de Oliveira (ed); GIOIELLI, Luiz Antonio (ed); VITOLO, Michele (ed); BARROS, Silvia Berlanga de Moraes (ed); STORPIRTIS, Silvia (ed); MARIA- ENGLER, Silvy Stuchi (ed); CONSIGLIERI, Vladi Olga (ed); ANDRICOPULO, Adriano Defini (ed); MIDIO, Antonio Flavio (ed); SALATINO, Antonio (ed); ABDALLA, Dulcinéia Saes Parra (ed); LAJOLO, Franco Maria (ed); LOPES, João Luis Callegari (ed); MANCINI-FILHO, Jorge (ed); SANTORO, Maria Inês Rocha Miritello (ed); PENTEADO, Marilene de Vuono Camargo (ed); YOSHIDA, Massayoshi (ed); CURI, Rui (ed); OGA, Seizi (ed); VILELA, Sueli (ed). Brazilian Journal of Pharmaceutical Sciences. São Paulo: Universidade de São Paulo - USP, 2022. .

Fator de Impacto: 1,214

MONOGRAFIA/LIVRO - NACIONAL

CHAVES, Almor; VASCONCELOS, Ado Jorio de; ANDRICOPULO, Adriano Defini; PRATA, Alvaro Toubes; GOMES, Anderson Stevens Leonidas; FOGUEL, Débora; OLIVA, Glauco; VIANA, Marcelo; ZIVIANI, Nivio. Ciência para prosperidade: sustentável e socialmente justa Brasília: Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial - EMBRAPPI, 2022.

MONOGRAFIA/LIVRO-ED/ORG - NACIONAL

ANDRICOPULO, Adriano Defini (ed); ZAGO, Marco Antonio (org); MELLO, Luiz Eugênio Araujo de (org); SLUYS, Marie-Anne Van (org); BOLZANI, Vanderlan da Silva (org); ARTAXO, Paulo (org); CHAIMOVICH GURALNIK, Hernan (coord); JOLY, Carlos Alfredo (coord); FRANCO, Bernadette Dora Gombossy de Melo (coord); MEDEIROS, Claudia Maria Bauzer (coord); ADORNO, Sérgio (coord); FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes (colab); VALLI, Marília (colab). FAPESP 60 anos: a Ciência no desenvolvimento nacional. São Carlos: Cubo, 2022. 221 p.

PARTE DE MONOGRAFIA/LIVRO - NACIONAL

ANDRICOPULO, Adriano Defini; SABINO, Ester Cerdeira; ZATZ, Mayana; REIMÃO, Juliana Quero; CASTRO, Marcia Caldas de. Saúde humana e os desafios globais das doenças crônicas e infecciosas. In: ANDRICOPULO, Adriano Defini, (ed). FAPESP 60 anos: a Ciência no desenvolvimento nacional. São Carlos: Cubo, 2022. cap. 6, p. 166-189.

VAN SLUYS, Marie-Anne; MELLO, Luiz Eugênio; BOLZANI, Vanderlan da Silva; ARTAXO, Paulo; ANDRICOPULO, Adriano Defini; ZAGO, Marco Antonio. FAPESP 60 anos: uma homenagem da ACIESP. In: ANDRICOPULO, Adriano Defini, (ed). FAPESP 60 anos: a Ciência no desenvolvimento



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

nacional. São Carlos: Cubo, 2022. introdução, p. 6-19.

TRABALHO DE EVENTO-RESUMO - NACIONAL

CHAGAS, Thaynan Aparecida Bueno; FERNANDES, Fábio de Souza; ANDRICOPULO, Adriano Defini; COELHO, Fernando. Synthesis and biological evaluation of new antiparasitary agents containing the 1,2,4-oxadiazole core. In: CONGRESS ABCF, 6., 2022, Brasília, DF. Abstracts Book... São Paulo: Associação Brasileira de Ciências Farmacêuticas - ABCF, 2022. p. 60.

CHIPOLINE, Ingrid C.; BRASIL, Beatrice F. A.; VALLI, Marília; OLIVEIRA, Aldo Sena de; ANDRICOPULO, Adriano Defini; NASCIMENTO, Vanessa. Synthesis of 1,2,3-triazole selenides with anti-T. cruzi activity. In: REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUÍMICA - RASBQ, 45., 2022, Maceió. Anais... São Paulo: Sociedade Brasileira de Química - SBQ, 2022. p. 659, res. ORG.

COSTA, Felipe Ribaldo Ferreira da; SOUZA, Matheus da Silva; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Investigação de derivados de quinazolininas com propriedades anticâncer. In: SEMANA INTEGRADA DO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS - SIFSC, 12., 2022, São Carlos. Livro de Resumos... São Carlos: Instituto de Física de São Carlos - IFSC, 2022. p. 47, res. IC13.

COSTA, Felipe Ribaldo Ferreira da; SOUZA, Matheus da Silva; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Investigação de derivados de quinazolininas com propriedades anticâncer. In: SIMPÓSIO INTERNACIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO - SIICUSP, 30., 2022, São Carlos. Resumos... São Paulo: Universidade de São Paulo - USP, 2022. 5 p.

CRUZ, Luiza; SILVA, Adriana Corrêa da; FELTRIN, Clarissa; DICHARA, Maria; FERRINS, Lori; MORAES, Carolina Borsoi; SJO, Peter; ANDRICOPULO, Adriano Defini; MOWBRAY, Charles; OLIVEIRA, Ramon Guerra de; DESSOY, Marco Aurélio; SANTOS, Deborah Araújo dos; OLIVEIRA, Luiz Fernando Nascimento de; MOLLO, María Cruz; LEE, Eun; DUARTE, Simone Michelin; ANDRICOPULO, Renata Krogh; CHELUCCI, Rafael Consolin; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; KRATZ, Jadel Muller; DIAS, Luiz Carlos. Indoles hit-to-lead for chagas disease: lessons learned within the LOLA consortium. In: BRAZILIAN SYMPOSIUM ON MEDICINAL CHEMISTRY - BRAZMEDCHEM, 10., 2022, Campinas. Anais eletrônicos... Campinas: Galoá, 2022. v. 1, abstr. 152538.

FREITAS, Larissa de; VALLI, Marília; DAMETTO, Alessandra Cristina; PENNACCHI, Paula Comune; MARIA-ENGLER, Silvy Stuchi; ANDRICOPULO, Adriano Defini; BOLZANI, Vanderlan da Silva. Advanced glycation end products inhibition and in silico ADME properties of natural alkaloids from *Ocotea paranapiacabensis*. In: REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUÍMICA - RASBQ, 45., 2022, Maceió. Anais... São Paulo: Sociedade Brasileira de Química/SBQ, 2022. p. 555.

MOLLO, María Cruz; CRUZ, Luiza; DESSOY, Marco Aurélio; LEE, Eun; OLIVEIRA, Ramon Guerra de; DUTRA, Francielle; DUARTE, Simone Michelin; ANDRICOPULO, Renata Krogh; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; CHELUCCI, Rafael Consolin; FELTRIN, Clarissa; MORAES, Carolina Borsoi; ANDRICOPULO, Adriano Defini; KRATZ, Jadel; SJÖ, Peter; MOWBRAY, Charles; DIAS, Luiz Carlos. Antitrypanosomal Benzoxazinone series: hit-to-lead campaign and multiparametric optimization. In: BRAZILIAN SYMPOSIUM ON MEDICINAL CHEMISTRY - BRAZMEDCHEM, 10., 2022, Poços de Caldas. Anais eletrônicos... Campinas: Galoá, 2022. v. 1, abstr. 152552.

OLIVEIRA, Aldo Sena de; SALCEDO, David Leandro Palomino; ZAPP, Eduardo; BRONDANI, Daniela; HOPPE, Thaynara D.; BRONDANI, Patrícia B.; MEIER, Lidiane; JOHANN, Susana; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Molecular docking and quantum studies of lawsone dimers derivatives: new investigation of antioxidant behavior and antifungal activity. In: REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUÍMICA - RASBQ, 45., 2022, Maceió. Anais... São Paulo: Sociedade Brasileira de Química - SBQ, 2022. p. 581, res. MED-



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

01016.

RAFAEL, Larissa Daniela Dias; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Triagem de compostos bioativos em linhagem tumoral metastática de próstata. In: SEMANA INTEGRADA DO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS - SIFSC, 12., 2022, São Carlos. Livro de Resumos... São Carlos: Instituto de Física de São Carlos - IFSC, 2022. p. 49, res. IC14.

RAFAEL, Larissa Daniela Dias; SOUZA, Matheus da Silva; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Triagem de compostos bioativos em linhagem tumoral metastática de próstata. In: SIMPÓSIO INTERNACIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO - SIICUSP, 30., 2022, São Carlos. Resumos... São Paulo: Universidade de São Paulo - USP, 2022. 5 p.

SPARENBERG, Daniela D.; MACHADO, Valkiria; CENCI, Arthur Ribeiro; TEIXEIRA, Kerolain Faoro; SENS, Larissa; TIZZIANI, Tiago; NUNES, Ricardo José; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; YUNES, Rosendo Augusto; SANDJO, Louis Pergaud; ANDRICOPULO, Adriano Defini; OLIVEIRA, Aldo Sena de. Evaluation of pyrazolines as anti-alzheimer's agents: DFT, molecular docking, enzyme inhibition and pharmacokinetic studies. In: REUNIÃO DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUÍMICA - REGIONAL SUL - SBQ-SUL, 28., 2022, Ponta Grossa. Anais... São Paulo: Sociedade Brasileira de Química - SBQ, 2022. res. 7992548.

TELES, Henrique Rodrigues; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; VALLI, Marília; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Ligand-based drug design studies for a series of oxazole and oxadiazole derivatives with antileishmanial activity. In: REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUÍMICA - RASBQ, 45., 2022, Maceió. Anais... São Paulo: Sociedade Brasileira de Química - SBQ, 2022. p. 576, res. MED- 116.

VALLI, Marília; TELES, Henrique Rodrigues; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; ANDRICOPULO, Adriano Defini. Estudos de modelagem molecular para Metionil- tRNA sintetase de Leishmania infantum. In: REUNIÃO DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUÍMICA - REGIONAL SUL - SBQ-SUL, 28., 2022, Ponta Grossa. Anais... São Paulo: Sociedade Brasileira de Química - SBQ, 2022. res. ORG 7399790.

Web of Science

Total de citações = 5623 Índice H = 43

Google Scholar

Total de citações = 8706 Índice H = 51

1.2 Orientações

Iniciação científica

Felipe Ribaldo Ferreira da Costa (FAPESP 01/11/2021 a 31/10/2022)
Gustavo Augusto Vieira Macedo (Sem bolsa – 13/04/2022 a 12/04/2023)
Larissa Daniela Dias Rafael (CNPq – 01/11/2021 a 31/08/2022)
Maynara Afonso (Sem bolsa – 21/03/2022 a 20/03/2023)

Mestrado

Alex Rogério Medeiros (CAPES – 01/10/2018 a 29/02/2020 e Sem bolsa – 01/01/2021 a 17/05/2022)
Henrique Rodrigues Teles (CAPES – 01/04/2019 a 31/10/2020 e Sem bolsa – 01/03/2020 a 23/06/2022)

Doutorado

Maria Eduarda Souza Dias Lino (INCT) Matheus da Silva Souza (FAPESP)



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Pós-doutorado

Julia Medeiros Souza (FAPESP – conluído em 2021)

João Victor da Silva e Silva (CAPES)

Leonardo Luiz Gomes Ferreira (DNDi)

Marília Valli (FAPESP)

Marco Aurélio Dessoy (DNDi)

Pricila Fernandes Pflüger (FAPESP)

Rafael Consolun Chelucci (DNDi)

Técnicos de Laboratório

Simone Michelin Duarte

Renata Krogh Andricopulo

2 ATIVIDADES DE ENSINO

2.1 Graduação e Pós-Graduação

- 2022/1 - Disciplina: 7600081 - Planejamento de Fármacos/Carga horária da disciplina: 45h
- 2022/2 - Disciplina: 7600110 - Laboratório de Física Geral II/Carga horária da disciplina: 30h

2.2 Cursos extracurriculares

- Cerca de 80 conferências, palestras, seminários e cursos

3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E SERVIÇOS À COMUNIDADE

- Diretor Executivo da Academia de Ciências do Estado de São Paulo (ACIESP)
- Membro do International Advisory Board - Centenary of the International Union of Pure and Applied Chemistry - IUPAC.
- Membro Titular da IUPAC Chemistry and Human Health Division
- Coordenador de Transferência de Tecnologia e Membro do Comitê Executivo do Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos (CIBFar-CEPID/FAPESP)
- Coordenador Científico e Membro do Comitê de Governança do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia (INCT) em Biodiversidade e Produtos Naturais (INCT-BioNat)
- Membro de Comitês de Assessoramento da FAPESP, CAPES, CNPq e FINEP
- Editor Regional do Current Topics in Medicinal Chemistry.
- Editor Associado do Frontiers in Pharmacology.

4 PARTICIPAÇÃO EM COLEGIADOS E ENCARGOS ADMINISTRATIVOS

- Chefe do Departamento de Física e Ciência Interdisciplinar do IFSC/USP.
- Membro Titular do Conselho de Departamento FCI do IFSC/USP.
- Membro Titular da Congregação do IFSC/USP.
- Membro Titular do Conselho Técnico Administrativo do IFSC/USP.
- Coordenador do Laboratório de Química Medicinal e Computacional (LQMC) do IFSC/USP.

5 RECURSOS FINANCEIROS – PROJETOS DE PESQUISA

5.1 Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo – FAPESP

Processo FAPESP nº 2018/14268-9. Vigência: 2019 – atual

Projeto Temático: Descoberta de Fármacos Baseada na Estrutura do Receptor e do Ligante para a Leishmaniose e a Doença de Chagas a partir de Produtos Naturais Bioativos.

Coordenador: Adriano D. Andricopulo (IFSC/USP)



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

5.2 Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo – FAPESP

Processo FAPESP nº 13/50954-0. Vigência: 2014 – atual

Projeto Temático: Novos Agentes Terapêuticos obtidos de Bactérias Simbiontes de Invertebrados Brasileiros.

Coordenadora: Mônica Tallarico Pupo (FCFRP/USP), Adriano D. Andricopulo (IFSC/USP, Pesquisador Principal)

5.3 Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo – FAPESP

Processo FAPESP nº 2013/07600-3. Vigência: 2013 (renovação em 2018) – atual

Projeto CEPID: Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos – CIBFar.

Coordenador: Glaucius Oliva (IFSC/USP, Coordenador), Adriano D. Andricopulo (IFSC/USP, Membro do Comitê Executivo e Coordenador de Transferência de Tecnologia)

5.4 Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq

Processo nº 465637/2014-0. Vigência: 2017 – atual

Projeto INCT/MCTI/CNPq/Capes/FAPESP: Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Biodiversidade e Produtos Naturais – INCTBioNat.

Coordenadora: Vanderlan da Silva Bolzani (IQ/UNESP), Adriano D. Andricopulo (IFSC/USP, Membro do Comitê de Governança e Coordenador Científico)

5.5 Drugs for Neglected Diseases Initiative – DNDi

Processo USP: 2014.1.583.76.1. Vigência: 2016 – atual

Convênio de Pesquisa: Otimização para Novas Moléculas contra *Trypanosoma cruzi* e *Leishmania* spp.

Coordenador: Adriano D. Andricopulo (IFSC/USP)

5.6 Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq

Processo CNPq nº 309844/2017-7. Vigência: 3/2018 – atual

Produtividade em Pesquisa (PQ–Nível 1A): Estratégias Integradas de Química Medicinal no Planejamento de Candidatos a Novos Fármacos.

Coordenador: Adriano D. Andricopulo (IFSC/USP)

5.7 Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo – FAPESP

Processo FAPESP nº 15/50655-9. Vigência: 2019 – atual

Auxílio à Pesquisa – Parceria para Inovação Tecnológica – PITE: FAPESP/MMV/DNDi/UNICAMP/USP – Consortium to Discover New Drugs for the Treatment of Tropical Parasitic Diseases

Grant number: 15/50655-9. Coordenador: Luiz Carlos Dias (IQ/UNICAMP), Adriano D. Andricopulo (IFSC/USP, Pesquisador Principal)

6 OUTRAS PARTICULARIDADES

- Eleito em 2022 Membro Titular da Academia Brasileira de Ciências (ABC) na área de Ciências Químicas
- Bolsista de Produtividade em Pesquisa do CNPq – Nível 1A
- Secretário Regional da Sociedade Brasileira para o Progresso da Ciência – SBPC
- Fellow da Royal Society of Chemistry (RSC)
- Fellow da International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC)
- Membro Titular do Comitê Gestor do Fundo de Biotecnologia (CT-BIOTEC) do Fundo



- Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FNDCT)
- Full Member, Sigma Xi - The Scientific Research Honor Society

Prof. Dr. ALBERTO TANNÚS <http://lattes.cnpq.br/4594238453149089>*

1 ATIVIDADES DE PESQUISA

1.1 Produção científica

1.1.1 Produção científica – números Google Scholar

- 1) (<http://scholar.google.com.br/citations?user=PrE1GBkAAAAJ&hl=en>)
 - Total de trabalhos 382
 - Livros e Capítulos 6
 - Produção tecnológica
 - Patentes 4;
 - Software com registro 4;
 - Software sem registro 5;
 - Equipamentos 8
 - Total de citações 2631
 - Fator H 21
 - Fator i10 40
 - Author = (TANNUS A)
 - Data: 31/12/2022

Web of Science ResearcherID: B-9821 2012

(https://app-webofknowledge.ez67.periodicos.capes.gov.br/author/record/784648?lang=en_US)

Orcid: 0000-0002-1675-1971 (<http://orcid.org/0000-0002-1675-1971>)

- Total de trabalhos 198
- Total de citações 1969
- Fator H 18
- Author = (TANNUS A)
- Data: 31/12/2022

1.2 Trabalhos completos neste período, submetidos e em revisão.

1. TORRES, E., FROELICH, T., WANG, P., DELABARRE, L., MULLEN, M., ADRIANY, G., PIZETTA, D. C., MARTINS, M. J., Vidoto, E. L. G., TANNÚS, A., Garwood, M. B1-gradient based MRI using Frequency-modulated Rabi Encoded Echoes (FREE). MAGNETIC RESONANCE IN MEDICINE, v. 87 (2), p. 674-685, (2022).(<https://doi.org.ez67.periodicos.capes.gov.br/10.1002/mrm.29002>)
2. PASCOAL, V. D. B., MARCHESINI, R. B., ATHIÉ, M. C. P., MATOS, A. H. B., CONTE, F. F., PEREIRA, T. C., SECOLIN, R., GILIOLO, R., MALHEIROS, J. M., POLLI, R. S., TANNÚS, A., COVOLAN, L., PASCOAL, L. B., VIEIRA, A. S., CAVALHEIRO, E. A., CENDES, F., LOPES-CENDES, I. Modulating Expression of Endogenous Interleukin 1 Beta in the Acute Phase of the Pilocarpine Model of Epilepsy May Change Animal Survival. CELLULAR AND MOLECULAR NEUROBIOLOGY, v. 43, p. 367-380 (2022).(<https://link.springer.com/article/10.1007/s10571-022-01190-y>)
3. J Marcolan, ELG Vidoto, MJ Martins, DC Pizetta, H Louzada, A Tannús. Calibração e



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

metodologia de medidas aplicadas ao espectrômetro de ressonância magnética digital (DMRS) do CIERMag. Anais da XVII Jornada Brasileira de Ressonância Magnética – 22 a 25 de novembro de 2022 – AUREMN, Vol. 3, (2022) - 154488. (<https://repositorio.usp.br/directbitstream/c15330ae-2344-449d-9b1a-5de18b1c5957/3109305.pdf>)

4. L.G.C. Santos, K.T. Chaim, E.L. G. Vidoto, A. Tannús and D. Papoti. Development and characterization of a transmit/receive volume Birdcage Coil for knee MRI at 7T. IX Congresso Latino-Americano de Engenharia Biomédica (CLAIB 2022) e XXVIII Congresso Brasileiro de Engenharia Biomédica (CBEB 2022). Paper 8730 (2022).
5. Diego Szczupak, Luiz Guilherme de Castro Santos, Khallil taverna Chaim, Maria Concepción García Otaduy, David Schaeffer; Edson Luiz Gea Vidoto; Alberto Tannus; Afonso Costa Silva. Segmented solenoid RF coils for MRI of ex-vivo brain samples at ultra-high field pre-clinical and clinical scanners. Journal of Magnetic Resonance Open. Submitted (2022).

1.3 Orientações

1.3.1 Supervisão de pós-doutorado

- 1) Daniel Papoti. Desenvolvimento de transdutores de RF multicanais para transmissão para experimentos de Imagens por Ressonância Magnética do Tórax e abdômen em 7 Teslas. 2014 - Agora como professor colaborador;
- 2) Maurício Falvo. Subsistema de Prescrição Gráfica para o Console do Espectrômetro Digital do CIERMag. Início: 02/2016. CNPq-DTI-A – Projeto Minnesota

1.3.2 Dissertação de mestrado

- 1) Rafael Silva Montes. Desenvolvimento de Controle de Shimming Ativo para Espectrômetro Digital. Início em 2018 – em andamento
- 2) Julia Marcolan Teixeira. DESENVOLVIMENTO DE INSTRUMENTAÇÃO DIGITAL DE RM – Iniciado como aluno especial em Fevereiro de 2020 – em andamento como aluno regular.
- 3) Danilo Silva Correia. Integração do framework PyMR com o ambiente integrado de desenvolvimento Spyder e sua adaptação à projetos de Ressonância Magnética. Início em 2021 – em andamento.

1.3.3 Tese de doutorado

Nada a declarar

1.3.4 Iniciação científica

- 1) Diego Prospero Turibio. *Desenvolvimento de plug-ins para tratamento da linguagem F dentro de um ambiente integrado de desenvolvimento (IDE) e interface gráfica auxiliar.* Início 2017 – em andamento
- 2) Guilherme Mota Petrucci. *Aprimoramento e desenvolvimento da interface de representação do sistema de ressonância magnética em forma de grafo utilizando suas métricas como forma de validação.* CNPq-ITI. Início 2018 – em andamento
- 3) João Carlos Rodrigues Junior. *Gerenciamento e análise de testes dos subsistemas do Espectrômetro Digital de Ressonância Magnética (DMRS) do CIERMag.* CNPq-ITI. Início 2018 – Interrompida.
- 4) Carolina Cottas Medeiros. *Desenvolvimento de um Espectrômetro de Ressonância Magnética Digital (DMRS) para Relaxometria e Imagens de Ressonância Magnética de 19F (MRR, MRI) – Validação do Hardware Digital.* Iniciado em 2019 – em andamento.
- 5) Hendrik Dumith Louzada. *Desenvolvimento de Subsistemas de Equipamento de Imagens*



por Ressonância Magnética. Iniciado em 2019 – em andamento.

- 6) Caroline Maria Rocha Santos. *Síntese de um simulador de sinais de RM utilizando conceitos de FPGA. Iniciado em 2020 – em andamento.*

2 ATIVIDADES DE ENSINO

2.1 Graduação

- 1) **1º semestre 2022:**

Usufruindo período de Licença-prêmio

- 2) **2º semestre 2022:**

Usufruindo período de Licença-prêmio

2.2 Pós-Graduação

Nada a declarar

2.3 Atividades extracurriculares

Nada a declarar

3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E SERVIÇOS À COMUNIDADE

Nada a declarar

4 PARTICIPAÇÃO EM COLEGIADOS E ENCARGOS ADMINISTRATIVOS

- Responsável pela Oficina de Manutenção a Vácuo e suprimento de ar comprimido. Desde 1/11/2000 até o presente momento.
- Integrante, Avaliação de Projetos de Iniciação Científica, junto a Comitê Externo, 16/5/2007 a atual (CNPq).

5 RECURSOS FINANCEIROS – PROJETOS DE PESQUISA

5.1 Imaging Human Brain Function with Minimal Mobility Restrictions; Subprojeto: Desenvolvimento de um Espectrômetro de Ressonância Magnética Digital (DMRS) para Relaxometria e Imagens de Ressonância Magnética de 19F (MRR, MRI).

Total para o Consortium: US\$ 10799120.00

Nosso subprojeto: US\$ 614465.18 + US\$ 23655.00) para a execução do projeto em parceria (Iniciado em 2017, vigente até 2022 –prorrogado por um ano)

6 OUTRAS PARTICULARIDADES

Pareceres “Ad hoc” para as seguintes instituições/periódicos:

- USP/IFSC
- FAPESP:
- USP/FFCLRP:
- CNPq
- FAPEMIG
- FACEPE
- SSNMR



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Prof. Dr. EDUARDO RIBEIRO DE AZEVEDO <http://lattes.cnpq.br/7686768230673663>*

1 ATIVIDADES DE PESQUISA

No período referente a este relatório foram realizadas pesquisas referentes ao desenvolvimento de métodos de abordagem de RMN para os estudos de materiais orgânicos, caracterização de matéria orgânica por RMN e caracterização da degradação natural e induzida na microestrutura de polímeros (área referente ao termo de cooperação firmado junto ao CENPES/Petrobras). O docente participou da publicação de 10 artigos científicos em revistas indexadas com fator de impacto médio de 5,95, sendo a revista de maior fator de impacto de 10,2 e a de menos de 1,0. Os artigos dos quais participou da publicação (considerando toda a vida acadêmica) foram citados 350 vezes no período a que se refere esse relatório, com um percentual de autocitação de 11%. O fator H ao final do ano de 2022 foi de 33 segundo o ISI e 37 segundo o Google Scholar. Bolsa de Produtividade em Pesquisa do CNPq nível 1C.

1.1 Produção científica

- Pellegrini, Vanessa de Oliveira Arnoldi; Ratti, Regiane Priscila; Filgueiras, Jefferson Gonçalves; Falvo, Maurício; Coral, Marisa Aparecida Lima; Guimaraes, Francisco Eduardo Gontijo; DeAzevedo, Eduardo Ribeiro; Polikarpov, Igor; ,Differences in chemical composition and physical properties caused by industrial storage on sugarcane bagasse result in its efficient enzymatic hydrolysis, *Sustainable Energy & Fuels*, 6, 2, 329-348, 2022, Royal Society of Chemistry
- Teodoro, Filipe Simões; Soares, Liliane Catone; Filgueiras, Jefferson Gonçalves; de Azevedo, Eduardo Ribeiro; Patiño-Agudelo, Álvaro Javier; Adarme, Oscar Fernando Herrera; da Silva, Luis Henrique Mendes; Gurgel, Leandro Vinícius Alves; ,Batch and continuous adsorption of Cu (II) and Zn (II) ions from aqueous solution on bi-functionalized sugarcane-based biosorbent, *Environmental Science and Pollution Research*, 1-24, 2022, Springer Berlin Heidelberg
- Garcia, Rodrigo Henrique dos Santos; Filgueiras, Jefferson Gonçalves; Colnago, Luiz Alberto; de Azevedo, Eduardo Ribeiro; ,Real-Time Monitoring Polymerization Reactions Using Dipolar Echoes in 1H Time Domain NMR at a Low Magnetic Field, *Molecules*, 27, 2, 566, 2022, MDPI
- Fenerick, Rafael; de Azevedo, Eduardo Ribeiro; de Moraes, Tiago Bueno; ,A control system for performing automated time-domain NMR measurements in Bruker Minispec spectrometers, *IEEE Latin America Transactions*, 20, 6, 1025-1031, 2022, IEEE
- do Espírito Santo, Melissa Cristina; Thema, Force Tefo; Pellegrini, Vanessa de Oliveira Arnoldi; Kane, Aissata Ousmane; Guimaraes, Francisco Eduardo Gontijo; Filgueiras, Jefferson G; Novotny, Etelvino Henrique; DeAzevedo, Eduardo Ribeiro; Polikarpov, Igor; ,When the order matters: impacts of lignin removal and xylan conformation on the physical structure and enzymatic hydrolysis of sugarcane bagasse, *Industrial Crops and Products*, 180, 114708, 2022, Elsevier
- Hans, Meenu; Pellegrini, Vanessa OA; Filgueiras, Jefferson G; de Azevedo, Eduardo R; Guimaraes, Francisco EC; Chandel, Anuj Kumar; Polikarpov, Igor; Chadha, Bhupinder Singh; Kumar, Sachin; ,Optimization of dilute acid pretreatment for enhanced release of fermentable sugars from sugarcane bagasse and validation by biophysical characterization, *BioEnergy Research*, 1-19, 2022, Springer US
- Perez, Martha Gonzales; Lima, Aline Pinde; Moraes, Tiago Bueno; Chaves, Erica Gervasoni; da Silva Ruiz, Naira Machado; dos Santos Teixeira, Sylvia Correa; de Angeli Honorato, Hercílio; de Menezes, Sonia Maria Cabral; DeAzevedo, Eduardo Ribeiro; ,1H Time Domain NMR to probe microstructural and mobility changes in Polyamide 11 exposed to H2S scavengers. What type of information can be assessed?, *Polymer Degradation and Stability*, 202, 110001, 2022, Elsevier
- Santo, Melissa C Espírito; Kane, Aissata Ousmane; Pellegrini, Vanessa OA; Thema, Force



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Tefo; García, José M; Acevedo, Alberto; Erazzú, Luis E; Guimaraes, Francisco EG; deAzevedo, Eduardo R; Polikarpov, Igor; , "Leaves from four different sugarcane varieties as potential renewable feedstocks for second-generation ethanol production: Pretreatments, chemical composition, physical structure, and enzymatic hydrolysis yields", *Biocatalysis and Agricultural Biotechnology*, 45, 102485, 2022, Elsevier

- de Mello Capetti, Caio Cesar; Pellegrini, Vanessa Oliveira Arnoldi; Santo, Melissa Cristina Espirito; Cortez, Anelyse Abreu; Falvo, Maurício; da Silva Curvelo, Antonio Aprigio; Campos, Eleonora; Filgueiras, Jefferson Gonçalves; Guimaraes, Francisco Eduardo Gontijo; de Azevedo, Eduardo Ribeiro; , Enzymatic production of xylooligosaccharides from corn cobs: Assessment of two different pretreatment strategies, *Carbohydrate Polymers*, 299, 120174, 2023, Elsevier
- Novotny, Etelvino H; Garcia, Rodrigo HS; deAzevedo, Eduardo R; , "Pulse sequence induced variability combined with multivariate analysis as a potential tool for ¹³C solid-state NMR signals separation, quantification, and classification", *Journal of Magnetic Resonance Open*, 14, 100089, 2023, Elsevier
- Santisteban, Oscar AN; Sacco, Guilherme M; Guarnieri, Guilherme De Paula; de Godoy, Moacir Fernandes; de Azevedo, Eduardo Ribeiro; Nery, José Geraldo; , Syntheses of novel topical hemostatic agents based on pectin biopolymer aiming hemorrhage control: Thromboelastographic studies and non-homogeneous swelling effect, *Materials Today Communications*, 33, 104989, 2022, Elsevier

1.2 Orientações

Pesquisador Visitante:

- Sonia Maria Cabral de Menezes (Financiamento: Termo de Cooperação CENPES/PETROBRAS).

Pós-doutorado:

- Rodrigo Henrique Garcia (Financiamento: Termo de Cooperação CENPES/PETROBRAS).

Mestrado:

- Diego Firme Bernardes. (Financiamento: CNPq)

Iniciação Científica:

- Bruno Trebbi (Financiamento: FAPESP)
- Marina Perassolli de Lazari (Financiamento: Termo de Cooperação CENPES/PETROBRAS)
- Victor Richard Cardoso (Financiamento: Termo de Cooperação CENPES/PETROBRAS)
- João Gabriel da Silva Soares (Financiamento: Dow Chemical)
- Matheus Benincasa da Silva (sem Bolsa)
- Stefano Calabrez Mendes (Financiamento: PUB – USP)
- João Eduardo de Oliveira (Financiamento: PUB – USP)
- Victor Hugo Videira Miranda (Financiamento: PUB – USP)

2 ATIVIDADES DE ENSINO

2.1 Graduação

- Disciplina: 7600006 2 Física II - Turma 2022208. Carga horária na disciplina: aula: 75 h
- Disciplina: 7600012 2 Direcionamento Acadêmico II. Carga horária na disciplina: aula: 2,5 h
- Disciplina: 7600102 2 Física Geral II. Carga horária na disciplina: aula: 60 h

Obs: Por estar usufruindo licença prêmio não houve atribuição didática no primeiro semestre de 2022.



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

2.2 Pós-graduação

(Nada a declarar)

2.3 Cursos extra-curriculares

(Nada a Declarar)

3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E SERVIÇOS À COMUNIDADE

Termo de cooperação desenvolvido em parceria com colaboradores do Cenpes/Petrobras, com apoio da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP). Uso da ressonância magnética nuclear na elucidação da microestrutura e dinâmica de polímeros orgânicos para avaliação de sua estabilidade e utilização em aplicações na indústria do petróleo.

4 PARTICIPAÇÃO EM COLEGIADOS E ENCARGOS ADMINISTRATIVOS

- Membro titular da Comissão de pós-graduação do IFSC.
- Membro Titular do Conselho do Centro de divulgação Científica e Cultural de São Carlos (CDCC)
- Membro Suplente da Comissão de Curso do Bacharelado em Física do IFSC.

5 RECURSOS FINANCEIROS – PROJETOS DE PESQUISA

- Grant da Bolsa de Produtividade em Pesquisa do CNPQ (Nível 1C). Valor: R\$ 52.800,00. Vigência: 28/02/2020 a 28/02/2023.
- Termo de cooperação IFSC/CENPES/PETROBRAS. Valor: R\$ 699.818,48. Vigência: 31/12/2020 a 29/12/2023.
- Bolsa de Iniciação Científica FAPESP: Valor: R\$.6160,77. Vigência: 01/06/2022 a 31/12/2022.

6 OUTRAS PARTICULARIDADES

- Participação como presidente de uma banca de contratação de docente no IFSC.
- Participação como avaliador de estágio probatório CERT
- Participação em Banca de Defesa de doutorado de Oscar Antonio Niño Santisteba (UNESP/Rio Preto-SP).
- Participação em Banca de Defesa de doutorado de Filipe Simoes Teodoro, (UFOP/Ouro Preto-SP).
- Participação em Banca de Defesa de doutorado de Henrique Frulani de Paula Barbosa (IFSC/USP).
- Participação como avaliador em seção de conclusão de curso no IFSC/USP.
- Participação como palestrante convidado em workshop sobre aplicações de Benchtop NMR/Lisboa/Portugal.
- Participação como palestrante convidado Na Jornada Brasileira de RMN 2022/Fortaleza/Brasil.

Prof. Dr. HELLMUT ECKERT <http://lattes.cnpq.br/7357691451348243>*

1 ATIVIDADES DE PESQUISA

As atividades de pesquisa em 2022 focalizaram à pesquisa do estado vítreo, um material com grande relevância para a sociedade. Vidros e vitrocerâmicas são materiais com propriedades



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

tecnologicamente muito importantes nas áreas de saúde (*biovidros*), conversão de energia (pilhas), fotônica (lasers), e de construção. Para o desenvolvimento dos vidros com propriedades adaptados aos requerimentos tecnológicos precisamos entender a relação entre as propriedades físico-químicas e a composição e estrutura deles. Para este fim, a técnica de ressonância magnética nuclear (RMN) oferece oportunidades únicas para aprender a organização estrutural no alcance atômico e nanométrico. Assuntos importantes neste contexto são as interações entre diferentes geradores de rede (*network former mixing effects*), a otimização do ambiente de ions luminescentes em vidros fotônicos, e os mecanismos de cristalização gerando vitro-cerâmicas com alta condutividade elétrica.

Em 2022 publicaram 12 artigos em revistas com política editorial seletiva (geralmente revistas Q1) e uma resenha convidada/invited review, todos gerando 1060 citações (Scopus, 04/01/2023). No total, nossos indicadores quantitativos (Scopus) são: N = 576, H = 60, citações total 17209 (04 de janeiro, 2023).

1.1. Produção científica

1.1.1. Artigos publicados em revistas com política editorial seletiva:

Site Preferences and Ion Dynamics in Lithium Chalcohalide Solid Solutions with Argyrodite Structure: I. A Multinuclear solid. State NMR study of the System $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{-xSex}$ and of $\text{Li}_6\text{AsS}_5\text{I}$, B. Koch, S. T. Kong, Ö. Gün, H. J. Deiseroth, H. Eckert, Z. Phys. Chem. 236, 853-874 (2022).

Site Preferences and Ion Dynamics in Lithium Chalcohalide Solid Solutions with Argyrodite Structure: II. A Multinuclear solid. State NMR study of the System $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{-xSex}$ and of $\text{Li}_6\text{AsS}_5\text{X}$ (X = Cl, Br), B. Koch, S. T. Kong, Ö. Gün, H. J. Deiseroth, H. Eckert, Z. Phys. Chem. 236, 875-898 (2022).

Inorganic-organic hybrid materials based on the intercalation of radical cations: 2-(4-N-methylpyridinium)-4,4,5,5-tetramethyl-4,5-dihydro-1H-imidazol-1-oxyl-3-N-oxide in fluoromica clay, S. Klabunde, C. Doerenkamp, M. de Oliveira Jr, Z. Zeng, H. Eckert, Z. Phys. Chem. 236, 961-978 (2022).

Correlating Sulfur Solubility with Short-to-Intermediate Range Ordering in the Structure of Borosilicate Glasses, R. Saini, S. Kapoor, D. R. Neuville, R. E. Youngman, B. M. Cerrutti, J. S. McCloy, H. Eckert, A. Goel, J. Phys. Chem. C 126, 655-674 (2022).

Silica incorporation into sodium aluminum phosphate glasses: Structural characterization by Raman spectroscopy and multinuclear solid-state NMR, M. Logrado, H. Eckert, H. Ikeda, S. Nakane, H. Yamazaki, J. Non Cryst. Solids 579, 121366 (2022).

A theoretical and experimental investigation of homo- and heteroconnectivity in barium silicates, B. J. A. Moulton, E. O. Gomes, T. R. Cunha, C. Doerenkamp, C. Gracia, H. Eckert, L. Andres, P. S. Pizani, Am. Miner. 107, 716-728 (2022).

A critical evaluation of barium silicate glass polymerization, B. J. A. Moulton, A. Picinin, L.D. Silva, C. Doerenkamp, H. Lozano, D. Sampaio, E. D. Zannotto, J. Du, H. Eckert, P.S. Pizani, J. Non Cryst. Solids 583, 121477 (2022).

Analysis and Information Content of Quadrupolar NMR in Glasses: ^{25}Mg NMR in Vitreous MgSiO_3 and $\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$, M. de Oliveira Jr., H. Damasceno P. S. Salmon, H. Eckert, J. Magn. Reson Open 12-13, 100067 (2022).

Solid-State NMR Investigation of Fast Sodium Ion-Conducting Glass Ceramics: The System $\text{Na}_{3+3x-y}\text{RE}_{1-x}\text{PySi}_3\text{-yO}_9$ (RE = Sc, Y), I. d'Anciães Almeida Silva, A.C.M. Rodrigues, H. Eckert, J. Am. Ceram. Soc. 105, 7502-7521 (2022).



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Oxy-Borylenes as Photoreductants: Synthesis and Application in Dehalogenation and Detosylation Reactions, P. Lenz, R. Oshimizu, S. Klabunde, C. G. Daniliuc; C. Mück-Lichtenfeld, J. C. Tendyck, T. Mori, W. Uhl, M. R. Hansen, H. Eckert, S. Yamaguchi, A. Studer, *Angew. Chem. Int.* 61, e202209391 (2022).

Structural rearrangements during sub-T_g relaxation and nucleation in lithium disilicate glass revealed by a solid-state NMR/MD strategy, H. Bradtmüller, A. Gaddam, H. Eckert, E. D. Zanotto, *Acta Materialia* 240, 118318 (2022).

Manganese(II) Thiophosphate (MnPS₃) Intercalates with Lanthanide (PrIII and NdIII) Complexes: Optical and Magnetic Properties, P. Fuentealba, J. Morales, N. Audebrand, C. J. Magon, H. Eckert, J. Manzur, E. Spodine, *New J Chem.* 46, 19984–19990 (2022).

1.2. Orientações

Em 2022 não houveram titulações sob orientação do docente no IFSC. Atualmente está orientando duas alunas de Iniciação Científica (projetos PUB e FAPESP), um aluno de Mestrado do IFSC (sem bolsa) e dois alunos de doutorado no IFSC (financiados pela FAPESP e Nippon Electric Glass). Além disso, foi supervisor de três pós-docs (FAPESP). Os termos de dois deles foram concluídos em 2022. Também é co-supervisor de um pós-doc FAPESP da UFSCar. Pela sua associação com a Universidade de Münster, Alemanha, foi co-orientador de 3 alunos doutorados, que são pagos de seus recursos de DFG na Universidade de Münster. Duas deles (Sina Klabunde e Anna-Lena Wübker) defenderam a tese de doutorado em setembro de 2022 e receberam títulos de Dr.rer. nat.

<u>Nome</u>	<u>Anos</u>	<u>Programa (recurso)</u>
Isabela Branco (IFSC)	2021-2023	Iniciação Científica (PUB)
Yara Gomes (IFSC)	2021-2023	Iniciação Científica (FAPESP)
Hugo Damasceno (IFSC)	2019-2023	Mestrado Física (sem bolsa)
Millena Logrado (IFSC)	2019-2023	Doutorado Física (NEG)
Laureano Hernandez (IFSC)	2022-2026	Doutorado Física (FAPESP)
Anna-Lena Wübker (WWU Münster)*	2016-2022	Doutorado Química (DFG)
Sina Klabunde (WWU Münster)*	2016-2022	Doutorado Química (DFG)
Maximilian Gerdes (WWU Münster)	2019-2023	Doutorado Química (DFG)
Dr. Igor d'Danciaes Silva* (IFSC)	2018-2022	pós-doc (FAPESP)
Dr. Maria Costa* (IFSC)	2016-2021	pós-doc (FAPESP)
Dr. Anuraag Gaddam (IFSC)	2021-2023	pós-doc (FAPESP)
<u>Dr. Henrik Bradtmüller (WWU Münster)</u>	<u>2020-2023</u>	<u>pós-doc (UFSCar)</u>

*concluído durante 2022

2 ATIVIDADES DE ENSINO

2.1. Graduação

Ensinou duas alunas de IC em projetos de pesquisa. Tratam-se de medidas DSC e RMN em biovidros de fosfatos e silicatos.

2.2. Pós-graduação

Ofereceu a disciplina 5769 (Termodinâmica e Físico Química do estado sólido) que foi cancelada pela falta de adesão estudantil. No segundo semestre, deu aulas presenciais na disciplina Espectroscopia Física, SFI 5800; 9 alunos.

2.3. Cursos extracurriculares

No ambiente internacional, está ministrando regularmente minicursos de Ressonância Magnética Nuclear, e de vários assuntos da Espectroscopia Física. Pelo convênio, dentro do ambiente *ERASMUS-MUNDUS*, IFSC fica uma instituição associada ao Programa Mestrado Europeio *Master*



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

in *Materials Science Exploring Large Scale Facilities*, (MaMaSELF), em que participou como docente visitante, na Universidade Montpellier. Deu um minicurso *online*, *Solid State NMR*, em janeiro 2022, 12 horas.

3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E SERVIÇOS À COMUNIDADE

Apresentou 6 palestras convidadas:

- 1) Modern solid-state NMR techniques for the study of structure and dynamics in lithium ion battery components, 2nd ELSICS meeting, Göttingen, Setembro 2022.
- 2) NMR Structural Studies of Glasses – A Transcontinental Experiment. Humboldt-Kolleg, Universidad de Montevideo, Outubro 2022.
- 3) NMR Crystallography – A new approach for the structural characterization of inorganic molecular solids, Department of Chemistry, Universidad de Chile de Santiago, Outubro 2022
- 4) Advanced Solid-State NMR Strategies for the Structural Elucidation of Functional Materials, Department of Chemistry, Universidad de Chile de Santiago, Outubro 2022
- 5) Short- and Medium Range Order in Glasses: New Insights from Modern Magnetic Resonance Techniques, XVIII Encuentro de Química Inorgánica, Chile, Outubro 2022,
- 6) New NMR Strategies for Studying Structural Relaxation and Crystal Nucleation in Glasses, RWTH Aachen, Dezembro 2022.

O docente continua como membro das comissões de planejamento de seguintes congressos: *International Symposium on Non-Oxide Glasses (ISNOG)*, e *Borate/Phosphate Conference*.

2022 foi declarado como “United Nations International Year of Glass (IYOG)”. Participou como palestrante convidado num curso “Structure of Glass”, organizado pelo Iowa State University. Nessa atividade deu aulas sobre investigações estruturais em vidros, usando as técnicas de RMN e EPR (4 horas *online*).

4 PARTICIPAÇÃO EM COLEGIADOS E ENCARGOS ADMINISTRATIVOS

É membro titular do Conselho de FCI e da Congregação do IFSC. Atuou como membro titular eleito de uma banca de um concurso para Professor Titular, IFGW Unicamp (7 candidatos, 4 vagas). Serviu como membro de uma comissão *ad hoc* encarregado com o planejamento departamental para novas vagas no IFSC. Serve regularmente em bancas de doutorado no IFSC e na WWU Münster). Desde 2018 serve como Membro da Coordenação Física, FAPESP, São Paulo.

5 RECURSOS FINANCEIROS – PROJETOS DE PESQUISA

Para suas pesquisas o professor conta com recursos financeiros de seguintes projetos:

FAPESP 2013-07793-6: CEPID, Pesquisador Principal e Vice Coordenador, *Center of Research, Technology and Education in Vitreous Materials (CeRTEV)*; 2019-2024.

CNPq, Projeto Universal: Novos Materiais Ópticos baseados em Vidros e Cerâmicas de Oxifluoreto Dopado de Terras Raras: Estudos Estruturais por Métodos de Ressonância Magnética: 2019-2023.

CNPq, Bolsa de Produtividade em Pesquisa, Nível 1A: Estrutura e Função em Materiais Desordenados Estudadas por Ressonância Magnética: 2021-2025.

Nippon Glass: convênio: *Structural Characterization of Crack-resistant Glasses*

FAPESP, três bolsas de pós-doc, uma bolsa de doutorado, uma bolsa IC.

DFG, SFB 858, projeto B11: *Cooperativity in Organic Spin-carrying Materials and their Hybrid Systems: Controlling Magnetic Properties via Radical Orientation*: 2018-2022.

DFG 413550885, *New Optical Materials based on Rare Earth Doped Oxyfluoride Glasses and*



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Ceramics: Structural Studies by Magnetic Resonance Methods: 2019 – 2023.

6 OUTRAS PARTICULARIDADES

É bolsista de Produtividade em Pesquisa de CNPq- Nível 1A, renovado em 2021. É membro correspondente de Academia de Ciência do Estado Nordrhein-Westfalen (desde 2006), e membro de Corpo Editorial da revista *Solid State Nuclear Magnetic Resonance*. Na database *Scopus* se encontram 576 publicações com 17209 citações (data 04/01/2022); número médio de citações por publicação = 29.9; índice H = 60.

Com base nas informações acima apresentadas acredita-se que o professor está desempenhando adequadamente as suas funções regulares da USP.

Prof. Dr. RAFAEL VICTÓRIO CARVALHO GUIDO <http://lattes.cnpq.br/2540731936765059>*

1 ATIVIDADES DE PESQUISA

1.1 Produção científica

No ano de 2022 as atividades de pesquisa em doenças infecciosas foram continuadas. A pesquisa que o docente vêm conduzindo no IFSC-USP integra estudos de ciência básica e aplicada que incluem métodos em Biologia Estrutural e Química Medicinal visando-se à: i) elucidação e compreensão das bases moleculares responsáveis pela estrutura, função e reconhecimento molecular de alvos biológicos; e, ii) utilização do conhecimento estrutural para a descoberta e desenvolvimento de candidatos a novos agroquímicos e fármacos.

No ano de 2022 foram publicados 12 trabalhos em revistas indexadas internacionais:

- 1) Inácio, Marielle Cascaes; Paz, Tiago Antunes; Wijeratne, E. M. Kithsiri; Gunaherath, G. M. Kamal B.; Guido, Rafael V. C.; Gunatilaka, A. A. Leslie Antimicrobial activity of some celastroloids and their derivatives. *MEDICINAL CHEMISTRY RESEARCH*. v.31, p.1 - 12, 2022. Fator de Impacto(2021 JCR): 2,3510
- 2) Mottin, Melina; Caesar, Lindsay K.; Brodsky, David; Mesquita, Nathalya C.M.R.; De Oliveira, Kettlyn Zagato; Noske, Gabriela Dias; Sousa, Bruna K.P.; Ramos, Paulo R.P.S.; Jarmer, Hannah; Loh, Bonnie; Zorn, Kimberley M.; Foil, Daniel H.; Torres, Pedro M.; Guido, Rafael V.C.; Oliva, Glaucius; Scholle, Frank; Ekins, Sean; Cech, Nadja B.; Andrade, Carolina H.; Laster, Scott M. Chalcones from *Angelica keiskei* (ashitaba) inhibit key Zika virus replication proteins. *BIOORGANIC CHEMISTRY*. v.120, p.105649 - , 2022. Fator de Impacto(2021 JCR): 5,3070
- 3) Dutra, Luiz A.; Lacerda, Mariella G.; Destro Inácio, Maiara; Martins, Johnny W.L.; Lopes Silva, Ana C.; Bento Da Silva, Patricia; Chorilli, Marlus; Amato, Angélica A.; Baviera, Amanda M.; Passarelli, Marisa; Guido, Rafael V.C.; Dos Santos, Jean L. Discovery of (E)- 4-styrylphenoxy-propanamide: A Dual PPAR α / γ Partial Agonist that Regulates High- Density Lipoprotein-Cholesterol Levels, Modulates Adipogenesis, and Improves Glucose Tolerance in Diet-Induced Obese Mice. *BIOORGANIC CHEMISTRY*. v.120, p.105600, 2022. Fator de Impacto(2021 JCR): 5,3070.
- 4) Mottin, Melina; De Paula Sousa, Bruna Katiele; De Moraes Roso Mesquita, Nathalya Cristina; De Oliveira, Kettlyn Irene Zagato; Noske, Gabriela Dias; Sartori, Geraldo Rodrigues; De Oliveira Albuquerque, Aline; Urbina, Fabio; Puhl, Ana C.; Moreira-Filho, José Teófilo; Souza, Guilherme E.; Guido, Rafael V. C.; Muratov, Eugene; Neves, Bruno Junior; Martins Da Silva, João Hermínio; Clark, Alex E.; Siqueira-Neto, Jair L.; Perryman, Alexander L.; Oliva, Glaucius; Ekins, Sean; Andrade, Carolina Horta. Discovery of New Zika Protease and Polymerase Inhibitors through the Open Science Collaboration Project OpenZika. *Journal of Chemical Information and Modeling*, v.62, p.1, 2022. Fator de Impacto(2021



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

JCR): 6,1620

- 5) Gomes, Paula; Guido, Rafael V. C. Editorial: Antimalarial chemotherapy in the XXIst century. *Frontiers in Pharmacology.*, v.13, p.1 - 3, 2022. Fator de Impacto(2021 JCR): 5,9880
- 6) Cortopassi, Wilian A.; Gunderson, Emma; Annunziato, Yasmin; Silva, Antony.E.S.; Dos Santos Ferreira, Amália; Garcia Teles, Carolina Bioni; Pimentel, Andre S.; Ramamoorthi, Roopa; Gazarini, Marcos; Meneghetti, Mario R.; Guido, Rafael.V.C.; Pereira, Dhelio B.; Jacobson, Matthew P.; Krettli, Antoniana U.; Caroline C Aguiar, Anna. Fighting Plasmodium chloroquine resistance with acetylenic chloroquine analogues. *International Journal for Parasitology-Drugs and Drug Resistance.*, v.20, p.1, 2022. Fator de Impacto(2021 JCR): 4,2840
- 7) Ramos, Paulo Ricardo Pimenta Da Silva; Mottin, Melina; Lima, Caroline Sprengel; Assis, Letícia R.; De Oliveira, Kettlyn Zagato; Mesquita, Nathalya Cristina De Moraes Roso; Cassani, Natasha Marques; Santos, Igor Andrade; Borba, Joyce Villa Verde Bastos; Fiaia Costa, Vinícius Alexandre; Neves, Bruno Junior; Guido, Rafael Victorio Carvalho; Oliva, Glaucius; Jardim, Ana Carolina Gomes; Regasini, Luis Octávio; Andrade, Carolina Horta Natural Compounds as Non-Nucleoside Inhibitors of Zika Virus Polymerase through Integration of In Silico and In Vitro Approaches. *PHARMACEUTICALS.* v.15, p.1493, 2022. Fator de Impacto(2021 JCR): 5,2150
- 8) De Amorim, Marcelo R.; Paz, Tiago A.; Pinto, Luciano Da S.; Hilário, Felipe; Zanini, Camila L.; Aguiar, Anna Caroline C.; Silva, Débora E. S.; Furlan, Maysa; Guido, Rafael V. C.; Bauab, Taís M.; Netto, Adelino V. De G.; Dos Santos, Lourdes C. New Isoquinoline Alkaloids from *Paraphaeosphaeria sporulosa* F03, a Fungal Endophyte Isolated from *Paepalanthus planifolius*. *PLANTA MEDICA.*, v.88, p.1 - 10, 2022. Fator de Impacto(2021 JCR): 3,0070
- 9) Cilli, Eduardo M.; Costa, Natalia C.S.; Santos-Filho, Norival A.; Piccoli, Julia P.; Fusco-Almeida, Ana M.; Santos, Claudia T.; De Souza, Juliana Oliveira; Zanini, Camila L.; Aguiar, Anna Caroline Campos; Oliva, Glaucius; Guido, Rafael V. C. New strategies for novel drugs: antimicrobial peptides containing ferrocene with improved antifungal and antiplasmodial biological activity. *PROTEIN AND PEPTIDE LETTERS.*, v.29, p.1, 2022. Fator de Impacto(2021 JCR): 1,9270
- 10) De Vries, Laura E.; Jansen, Patrick A. M.; Barcelo, Catalina; Munro, Justin; Verhoef, Julie M. J.; Pasaje, Charisse Florida A.; Rubiano, Kelly; Striepen, Josefina; Abla, Nada; Berning, Luuk; Bolscher, Judith M.; Demarta-Gatsi, Claudia; Henderson, Rob W. M.; Huijs, Tonnie; Koolen, Karin M. J.; Tumwebaze, Patrick K.; Yeo, Tomas; Aguiar, Anna C. C.; Angulo-Barturen, Iñigo; Churchyard, Alisje; Baum, Jake; Fernández, Benigno Crespo; Fuchs, Aline; Gamo, Francisco-Javier; Guido, Rafael V. C.; Jiménez-Díaz, María Belén; Pereira, Dhelio B.; Rochford, Rosemary; Roesch, Camille; Sanz, Laura M.; Trevitt, Graham; Witkowski, Benoit; Wittlin, Sergio; Cooper, Roland A.; Rosenthal, Philip J.; Sauerwein, Robert W.; Schalkwijk, Joost; Hermkens, Pedro H. H.; Bonnert, Roger V.; Campo, Brice; Fidock, David A.; Llinás, Manuel; Niles, Jacquín C.; Kooij, Taco W. A.; Dechering, Koen J. Preclinical characterization and target validation of the antimalarial pantothenamide MMV693183. *Nature Communications.*, v.13, p.1 - 16, 2022. Fator de Impacto(2021 JCR): 17,6940
- 11) Irabuena, Camila; Scarone, Laura; De Souza, Guilherme Eduardo; Aguiar, Anna Caroline Campos; Mendes, Giovana Rossi; Guido, Rafael Victorio Carvalho; Serra, Gloria Synthesis and antiplasmodial assessment of nitazoxanide and analogs as new antimalarial candidates. *MEDICINAL CHEMISTRY RESEARCH.* v.31, p.1 - 10, 2022. Fator de Impacto(2021 JCR): 2,3510
- 12) Barbosa, Camila S.; Ahmad, Anees; Maluf, Sarah El Chamy; Moura, Igor M. R.; Souza, Guilherme E.; Guerra, Giovanna A. H.; Barros, Roberto R. Moraes; Gazarini, Marcos L.; Aguiar, Anna C. C.; Burtoloso, Antonio C. B.; Guido, Rafael V. C. Synthesis, Structure-



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Activity Relationships, and Parasitological Profiling of Brussonol Derivatives as New Plasmodium falciparum Inhibitors. *PHARMACEUTICALS.*, v.15, p.814, 2022. Fator de Impacto(2021 JCR): 5,2150

As estatísticas da produção científica até dezembro/2022 estão apresentadas na Tabela 3.

Tabela 3. Estatísticas da produção científica até dezembro/2022.

Base de Dados	Trabalhos Publicados*	Citações	Fator H
ISI – Web of Science	82	1427	23
Scopus	88	1683	25
Google Scholar	333	2556	28

*Número total de trabalhos publicados em periódicos com seletiva política editorial = 95

Entre os artigos publicados em 2022 destacamos o artigo publicado no periódico *Pharmaceuticals* (doi: [10.3390/ph15070814](https://doi.org/10.3390/ph15070814)). O brussonol é um derivado do icetexano e membro de uma família de diterpenóides que foi isolado de várias plantas terrestres. O trabalho descreve a síntese e o perfil antiplasmodial de uma série de derivados do brussonol (Figura 2). Os compostos mostraram atividades inibitórias na faixa micromolar baixa contra um painel de cepas de *P. falciparum* sensíveis e resistentes (IC_{50} s = 5–16 μ M). Além disso, o brussonol mostrou inibição *in vitro* de ação rápida e um comportamento inibitório aditivo quando combinado com o antimalárico artesunato ($FIC_{index} \sim 1$). A investigação do modo de ação indicou que o brussonol aumentou os níveis citosólicos de cálcio no parasito. Portanto, a descoberta do brussonol como um novo esqueleto molecular dotado de atividade antiplasmodial nos permitirá planejar derivados com propriedades otimizadas para o desenvolvimento de candidatos a compostos líderes para a malária.

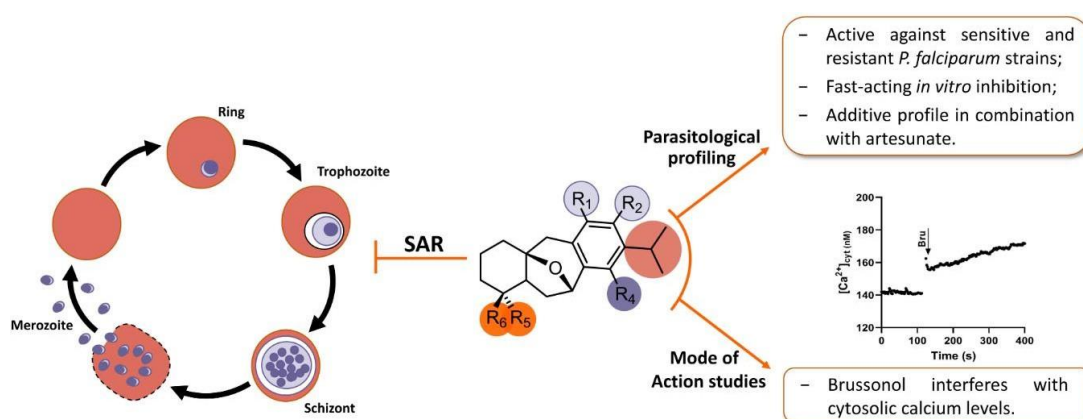


Figura 2. Resumo do estudo trabalho descreve a síntese e o perfil antiplasmodial de uma série de derivados d o brussonol publicado no periódico *Pharmaceuticals*, 15(7), 814 (2022) (doi: [10.3390/ph15070814](https://doi.org/10.3390/ph15070814)).

1.2 Orientações

O docente é orientador pleno (nível doutorado) do Programa de Pós-Graduação em Física do IFSC-USP (nível 7 da CAPES). Em 2022 supervisionou 5 pós-docs, 6 alunos doutorados, e 2 alunas mestrado (Tabela 3). A formação de recursos humanos incluiu a finalização de uma dissertação de mestrado (Camila Lima Zanini), uma tese de doutorado (Guilherme E. de Souza) e um projeto de pós-doutorado (Natália Menezes Moreira Borges) (Tabela 4).

Tabela 4. Lista de alunos de graduação/pós-graduação/pós-doc orientados em andamento em



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
 Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
 Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
 e-mail: cert@usp.br

2022.						
Aluno	Nível	Instituição	Curso	Orientador/ Coorientador	Financiamento	Situação
Alexandre Victor Fassio	Pós-Doc	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	FAPESP	Em andamento
Anna Caroline C. Aguiar	Pós-Doc	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	MMV	Em andamento
Sarah el Chamy Maluf	Pós-Doc	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	FAPESP	Em andamento
Guilherme E. de Souza	Pós-Doc	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	MMV	Em andamento
Camila de Souza Barbosa	Doutorado	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	CAPES	Em andamento
Victor H. R. Nogueira	Doutorado	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	CAPES	Em andamento
Mariana Ortiz de Godoi	Doutorado	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	CAPES	Em andamento
Igor Mota R. de Moura	Doutorado	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	FAPESP	Em andamento
Giovana Rossi Mendes	Doutorado	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	FAPESP	Em andamento
Gabriela Silva de Oliveira	Mestrado	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	CAPES	Em andamento
Natália Menezes Moreira Borges	Pós-Doc	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	FAPESP	Concluído
Guilherme E. de Souza	Doutorado	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	FAPESP	Concluído
Camila Lima Zanini	Mestrado	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	CAPES	Concluído

2 ATIVIDADES DE ENSINO

2.1 Graduação

Em 2022 foram ministradas 3 disciplinas teóricas e práticas oferecidas pelo IFSC-USP para os cursos de graduação: i) Bacharelado em Ciências Físicas e Biomoleculares; ii) Engenharia de Produção; e, iii) Engenharia Elétrica (Tabela 5).

Tabela 5. Disciplinas oferecidas junto ao IFSC no período 2022.

Ano/Semestre	Sigla	Disciplina	Duração	Carga horária	Alunos
--------------	-------	------------	---------	---------------	--------



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

2022/1º	7600109	Laboratório de Física I (Engenharia Produção)	17 semanas	60 horas (4 créditos)	45
2022/2º	7600110	Laboratório de Física II (Engenharia Elétrica)	16 semanas	30 horas (2 créditos)	24
2022/2º	7600080	Biologia Molecular Estrutural (Ciências Físicas e Biomoleculares)	19 semanas	60 horas (2 créditos)	26

2.2 Pós-Graduação

O docente é orientador pleno credenciado no Programa de Pós-Graduação em Física do IFSC/USP desde 2011 e atua como docente responsável pela disciplina "[SFI5866 – Química Medicinal: Fundamentos do Planejamento de Fármacos](#)". O programa da disciplina inclui os fundamentos e aplicações dos métodos modernos em Química Medicinal para o planejamento de novos fármacos. O estado da arte dos métodos de Relações entre a Estrutura e Atividade (SAR); Relações Quantitativas entre a Estrutura e Atividade 2D e 3D (QSAR 2D e 3D, respectivamente); Estudo de Propriedades Farmacocinéticas (ADME/Tox) e Ensaio Virtual são apresentados e discutidos profundamente com os alunos. O método de avaliação consiste na apresentação de um seminário sobre um artigo científico pré-selecionado que utiliza pelo menos um dos métodos abordados na disciplina ou como os métodos de descoberta de compostos bioativos podem ser úteis para a dissertação/tese do aluno matriculado. Nesses seminários, os alunos são avaliados em diversos aspectos que incluem: clareza da apresentação, capacidade de argumentação, domínio do tema e conhecimento sobre os fundamentos e limitações dos métodos em química medicinal utilizados no artigo. A disciplina é oferecida a cada dois anos, entretanto, devido ao número de docentes reduzido em 2022 para ministrarem as disciplinas obrigatórias dos cursos de graduação do IFSC, o docente foi designado a ministrar a disciplina Laboratório de Física II no 2º. Semestre de 2022. Tem previsão de oferecimento da disciplina de pós-graduação em 2024.

3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E SERVIÇOS À COMUNIDADE

Em 2022 foram ministradas 3 disciplinas teóricas e práticas oferecidas pelo IFSC-USP para os cursos de graduação: i) Bacharelado em

3.1 Programa Unificado de Bolsas de Estudos

Desde 2015, o docente tem trabalhado a convite da Profa. Leila Beltrami (Coordenadora de Educação e Difusão do Conhecimento do CIBFar/CEPID) como coordenador de um dos projetos de difusão do conhecimento conduzidos no CIBFar/CEPID. O projeto intitulado "Desenvolvimento de aplicativos interativos como ferramentas para educação e difusão do conhecimento em ciências" visa o desenvolvimento e disponibilização de mídias interativas abordando novos conteúdos relacionados à descoberta de novos medicamentos a partir de produtos naturais dos ecossistemas de nosso Estado (Mata Atlântica, Cerrado e Mangue), além dos diferentes jogos e mídias da série Parasitas Interativos (sobre Doença de Chagas e Malária). Esse projeto conta com apoio financeiro da Universidade de São Paulo através do programa Unificado de Bolsas de Estudos da Reitoria da USP. Em 2022, foram contempladas 8 bolsas de estudos para alunos de graduação dos cursos da USP – São Carlos. As atividades desenvolvidas pelos bolsistas consistiram no desenvolvimento de programas computacionais no formato de jogos educacionais, com visual e conteúdos atrativos para os jovens. Todas as ferramentas didáticos-pedagógicas desenvolvidas e utilizadas para educação em ciências (e.g., mídias interativas, jogos, multimídias, caça palavras) estão disponibilizadas nos portais <http://eic.usp.br> ou <http://cibfar.ifsc.usp.br>. Estes materiais são utilizados em escolas de ensino básico e instituições de ensino superior sendo um importante instrumento de divulgação dos conhecimentos gerados pela Coordenação de Educação e Difusão do Conhecimento em Ciências do CIBFar.

3.2 Future 17



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Em 2022 foi selecionado pela Pró-Reitoria de Pós-Graduação (PRPG), em parceria com a AUCANI, para participar como docente mentor do [programa Future 17](#). O Future 17 é uma nova iniciativa global oferecida pela University of Exeter e pela Quacquarelli Symonds Limited (QS) no Reino Unido e pelas principais universidades internacionais projetadas para apoiar docentes e discentes de Pós-Graduação a desenvolverem as habilidades necessárias para enfrentar de forma colaborativa os desafios globais do século XXI.

No Future 17 compartilhou com os Profs. Chennyfer Dobbins Abi Rached (EE) e Átila Alexandre Trapé (EEFERP) a mentoria de 8 alunos da USP e da Stellenbosch University (África do Sul). O time selecionou o modelo do “Economic and Social Council” (ECOSOC) da ONU relacionado ao Objetivo de Desenvolvimento Sustentável (ODS) 4. O projeto desenvolvido pelos alunos de graduação e pós-graduação visou oferecer novas alternativas para garantir uma educação de qualidade inclusiva e equitativa, bem como promover oportunidades de aprendizagem ao longo da vida para todos. Especificamente, o projeto visou criar soluções para garantir que todas as meninas e meninos recebam educação primária e secundária gratuita, equitativa e de qualidade, levando a resultados de aprendizagem relevantes e eficazes. Entre as principais conclusões do estudo cita-se:

- Desenvolver parcerias com governos nacionais e locais para aumentar a educação inclusiva nas escolas primárias
- Promover a formação adequada de professores e aumento de incentivos financeiros e profissionais
- Reestruturar o modo como as escolas primárias são financiadas pelo governo

3.3 Participação em bancas

Em 2022, participou como membro titular de 2 bancas de qualificação de doutorado (IQ- UNESP e IQSC-USP), 1 banca de tese de doutorado (IFSC-USP) e 3 bancas de dissertação de mestrado (IFSC-USP, ICB-USP e UFRJ).

3.4 Membro de corpo editorial

O docente foi editor convidado da editora *Frontiers* para o número especial da *Frontiers in Pharmacology* intitulado “[Antimalarial Chemotherapy in the XXIst Century](#)”. O número especial contou com 7 artigos, incluindo um editorial, três artigos de revisão da literatura e três artigos de pesquisa originais que abordaram os escopos e as limitações da descoberta e desenvolvimento de medicamentos antimaláricos. Até dezembro/2022, aproximadamente, 12.000 visualizações e mais de 2.300 downloads foram registrados na página do número especial. Dado o sucesso dessa iniciativa, foi convidado para editar um segundo volume do tópico em pesquisa sobre o desenvolvimento de novos antimaláricos. Por fim, foi convidado a integrar o corpo editorial do periódico *Frontiers in Drug Discovery* como editor associado.

4 PARTICIPAÇÃO EM COLEGIADOS E ENCARGOS ADMINISTRATIVOS

É membro suplente do [Conselho do Departamento de Física e Ciências Interdisciplinar– FCI](#) na categoria Professor Associado. Atualmente, exerce o segundo mandato como Vice-Presidente da Comissão de Pós-Graduação em Física do IFSC/USP (término da vigência fevereiro de 2024). Neste último ano de gestão, teve a oportunidade de contribuir para a Presidência da CPG para reverter as perdas de bolsas de seu Programa. Além disso, foi responsável pela elaboração dos exames de ingresso (1º e 2º semestre) nos cursos de Física Computacional e Física Biomolecular.

Uma das atribuições inerentes a Vice-Presidência da CPG é a assumir a Presidência da Comissão Interna do Programa de Aperfeiçoamento de Ensino (PAE). O PAE destina-se exclusivamente a alunos de Pós-Graduação matriculados na USP nos cursos de mestrado e doutorado e tem como objetivo aprimorar a formação do pós-graduando para atividade didática de graduação. Na liderança dessa Comissão a função do docente é coordenar os editais do processo seletivo bem como selecionar os estudantes de acordo com os critérios estabelecidos pela Comissão Interna. Esses



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

critérios foram discutidos com os membros da Comissão Interna e incluem: 1) Prioridade aos estudantes que estão participando pela primeira vez do Estágio Supervisionado em Docência; 2) Bom desempenho acadêmico com base no histórico escolar; 3) Ser bolsista CAPES, regularmente matriculados em curso de Doutorado; 4) Julgamento do mérito do plano de trabalho aos propósitos do programa; 5) Prioridade às solicitações de estudantes do Programa de Pós-Graduação da Unidade; 6) Prioridade aos alunos sem bolsa; e, 7) Prioridade aos alunos que tenham obtido maior média (em nível de graduação) na disciplina escolhida para o estágio PAE.

5 RECURSOS FINANCEIROS – PROJETOS DE PESQUISA

Atualmente, é coordenador de dois projetos que envolvem ensaios biológicos e *ex vivo* com financiamento da entidade sem fins lucrativos *Medicine for Malaria Venture* (MMV). A MMV apoia ambos os projetos através do financiamento de itens de consumo, diárias para realização de pesquisa de campo, passagens aéreas e pagamento de bolsa de pós-doc e serviço técnico. Além disso, é coordenador de um projeto regular da FAPESP intitulado “Descoberta de inibidores de *Plasmodium falciparum* a partir de plantas do Cerrado como candidatos a compostos líderes para a malária: Estudos integrados de cromatografia de ultra eficiência, espectroscopia e ensaios biológicos” (2020/12904-5).

Além desses projetos o docente contribui como Pesquisador Principal em projetos e redes de pesquisa com apoio financeiro da FAPESP e CAPES: i) PITE (Processo:15/50655-9) coordenado pelo Prof. Luiz Carlos Dias (UNICAMP); ii) Temático (Processo: 2019/17721-9 em fase de contratação) coordenado pelo Prof. Roberto G. S. Berlinck (IQSC/USP); e, iii) CAPES (Processo nº 23038.014330/2020-11), coordenado pelo Prof. Valtencir Zucolotto (IFSC/USP). Atua também como Pesquisador Associado do Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos (CIBFar/CEPID 2013/7600-3) e do Projeto Regular Especial COVID-19 (Processo: 2020/04602-9) ambos sob a coordenação do Prof. Glaucius Oliva.

6 OUTRAS PARTICULARIDADES

Foi assessor *ad hoc* de 9 processos FAPESP (2 projetos regulares, 1 projeto inicial, 1 projeto de doutorado, 1 projeto de mestrado, 1 relatório de projeto regular e 3 relatórios de iniciação científica), 1 projeto de pesquisa submetido para o programa da PRCEU, 1 proposta de credenciamento CERT da FCF-USP, 3 relatórios de pós-doc do IFSC, e 1 projeto da chamada CT- Biotec Nº 30/2022 do CNPq.

Atualmente, faz parte do quadro de assessores científicos de 22 periódicos nacionais e internacionais indexados nas áreas de química medicinal, planejamento de fármacos e biologia estrutural. Entre os periódicos para os quais presta assessoria científica destaca-se *Nature Communication*, *Journal of Medicinal Chemistry*, *Journal of Chemical Information and Modeling*, e *Chemical Biology & Drug Design*. Além disso, é assessor *ad hoc* para a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), Instituto de Física de São Carlos (IFSC-USP), Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), Universidad de La Republica, Uruguai, *The World Academy of Sciences* e *Elsevier*.

Por fim, um acordo de confidencialidade foi firmado com a empresa norte americana Collaborations Pharmaceuticals, Inc. (CPI). A CPI é uma empresa americana que visa agilizar o desenvolvimento de medicamentos para doenças tropicais raras e negligenciadas. Este é um empreendimento desafiador para grandes empresas farmacêuticas, mas também é viável para uma pequena empresa. Através da aplicação de uma tecnologia denominada “Assay Central” que combina a expertise de vários colaboradores acadêmicos, a CPI identifica candidatos para o tratamento de doenças parasitárias (*T. cruzi* e *P. falciparum*), bacterianas (*M. tuberculosis*) e virais (Ebola e HIV). A CPI faz a ponte entre a indústria e a academia, com foco em doenças raras e negligenciadas. Como empresa, são capazes de abrir novos caminhos para os colaboradores e, por meio de parcerias com grupos acadêmicos, a CPI pode participar de chamadas públicas com os colaboradores. A aplicação da estratégia experimental e computacional combinada limita custos de



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

consultoria e aquisição de compostos. Até o momento, o CPI recebeu 9 concessões do NIH e do DOD, duas designações órfãs da FDA e registrou várias patentes.

Em 2021, foi iniciado uma colaboração com a CPI focada na descoberta de novos candidatos a fármacos antimaláricos. Nestes trabalhos, são avaliados um conjunto de moléculas contra um painel de cepas resistentes do parasita causador da malária para verificar o potencial de resistência cruzada entre os candidatos e os antimaláricos padrão. Os resultados dessa parceria científica foram compilados e serão reportados em um artigo científico que será submetido para publicação em periódico especializado.

Não houve percepção de remuneração nesta atividade de pesquisa.

Prof. Dr. TITO JOSE BONAGAMBA <http://lattes.cnpq.br/2090018228785477>*

1 ATIVIDADES DE PESQUISA

O LEAR (<https://ifsc-lear.weebly.com/>) desenvolve atualmente os seguintes projetos:

1) Estudo de Meios Porosos por RMN e Microtomografia Tridimensional por Raios-X

Este projeto engloba atividades de pesquisa teóricas, experimentais, computacionais e de desenvolvimento de instrumentos, em parceria com pesquisadores do Cenes/Petrobras e Universidades Brasileiras e Estrangeiras. O objetivo principal do projeto visa o estudo da dinâmica de fluidos imersos em meios porosos, em condições normais de pressão e temperatura ou de reservatório, onde as pressões podem atingir 10.000 psi e as temperaturas 100 °C. Hoje, os experimentos de RMN podem ser realizados no LEAR, tanto com magnetos convencionais (resistivos, permanentes ou supercondutores), quanto com magnetos unilaterais permanentes (similares aos empregados nas ferramentas de perfuração de poços de petróleo). No caso dos magnetos unilaterais, desenvolvemos, em parceria com o Grupo de Pesquisa do Prof. Dimitrios Sakellariou da KU Leuven – Bélgica, um magneto com características avançadas, que está sendo utilizado com grande sucesso no momento para montagem de um simulador de ferramenta de perfuração de poço de petróleo. Esta nova infraestrutura fez com que nosso projeto submetido à Petrobras fosse considerado prioritário pela empresa, sendo aprovado para o período de 01/12/2020 a 30/03/2023 (com extensão prevista para 25/11/2023), tal como acima descrito (Projeto: “Estudo de Rochas Reservatório por Ressonância Magnética Nuclear – 1”)

Apesar de não ser uma área de pesquisa jovem e existirem equipamentos e métodos experimentais de RMN bem estabelecidos, estamos nos dedicando ao desenvolvimento de instrumentos e métodos avançados voltados ao estudo da interação das moléculas de fluidos com meios porosos, que apresentam propriedades morfológicas e físico-químicas complexas.

Para melhor entender os dados de RMN, foram utilizados, adicionalmente, dados provenientes de outras técnicas experimentais, destacando a microtomografia tridimensional por raios-x (disponível em nosso laboratório, com resolução de ~1µm), permeamtria (disponível em nosso laboratório), porosimetria e petrofísica básica (que fornece dados estruturais e de composição dos materiais, incluindo a presença de impurezas magnéticas, que interferem drasticamente nos experimentos de RMN).

De modo a correlacionar os dados estruturais e de composição dos meios porosos com as medidas de RMN, que são realizadas durante a perfuração de potenciais reservatórios de petróleo, estão sendo desenvolvidos programas com uma abordagem físico-computacional, que inclui conceitos de mecânica dos fluidos e física estatística, bem como informações sobre a microestrutura e propriedades físico-químicas do meio poroso, de modo a simular os dados de RMN.

Com o intuito de desenvolver pesquisa fortemente baseada em conhecimentos sólidos de geologia e geofísica, uma parceria foi estabelecida com o Grupo de Prof. Ricardo Ivan Ferreira da Trindade, do IAG/USP. Também estão sendo consolidadas parcerias com Grupos de Pesquisa da EP/USP (nas áreas de Engenharia de Petróleo e Ecocimento).



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Dentro do mesmo tema, de 20/09/2017 a 01/09/2022, foi mantida colaboração com a IBM dedicada ao estudo de parâmetros físicos de rochas, com destaque para permeabilidade, a partir de imagens tridimensionais obtidas por microtomografia tridimensional por Raios-X. Esta colaboração atingiu seu auge com a publicação de 2 artigos, em 2021 e em 2022, sobre estimativa de permeabilidade de rochas reservatório de petróleo. No momento, tem um artigo submetido à publicação, seguindo a mesma linha.

Faz parte também do projeto desenvolver um espectrômetro de RMN dedicado ao estudo de meios porosos, que já está construído, em parceria com a empresa americana Tecmag e a Petrobras. Este espectrômetro encontra-se em contínuo desenvolvimento, com a construção de novas sondas e acessórios, tendo duas versões, uma instalada no LEAR e outra no Cenpes/Petrobras. No momento, estão atuando na utilização de um espectrômetro que montamos acoplado ao nosso magneto unilateral, que emula uma ferramenta de perfilagem em condição de *Logging While Drilling*, com a obtenção de resultados promissores.

Em 2021, iniciaram importante colaboração envolvendo o emprego da RMN para o estudo de Ecocimentos, em parceria com o Prof. Vanderley M. John (EP/USP). Fruto dessa colaboração, desenvolveram uma metodologia de análise do cimento que está sendo a base para a criação de uma *Startup*. Para essa finalidade, um aluno de doutorado do Prof. Vanderley M. John e um pós-doc do LEAR estão seguindo o [Programa Nidus – InovaUSP](#).

Ainda, em 2021, melhoraram a colaboração com o CNPEM/LNLS, com destaque para Linha Mogno, dedicada a técnicas de nano e microtomografia (CT). No momento, estão discutindo um projeto comum, com o intuito de instalar um equipamento de RMN na linha Mogno para a realização de medidas simultâneas de processos que ocorrem ao longo do tempo em materiais, com destaque para meios porosos, com atenção especial para estudos que envolvem armazenamento de CO₂ em formações geológicas. Em 2023, esse projeto terá um desenvolvimento maior, com a contratação de um dos nossos pós-docs para atuar junto à linha Mogno.

Como fruto das colaborações com pesquisadores do CNPEM/LNLS e IAG/USP, está sendo proposto à ANP a estruturação da "Litoteca Digital/Analógica: uma visão geo-físico-química tridimensional que se estende dos nanômetros aos quilômetros", incluindo ferramentas computacionais avançadas para a gestão e a manipulação do acervo.

Em fevereiro de 2022, foi dada continuidade à colaboração com a empresa FIT para o desenvolvimento de um Espectrômetro de RMN nacional dedicado ao estudo de meios porosos e sistemas com complexidade dinâmica, com previsão do lançamento do equipamento denominado LEARFIT no segundo semestre de 2023.

No momento, está sendo consolidada uma importante parceria com a Saint-Gobain - Quartzolit dedicada ao estudo de argamassas, com a participação de um aluno de mestrado com bolsa oferecida pela empresa.

2) Informação Quântica por meio de RMN e RQN

Essa é a linha de pesquisa mais básica do LEAR, pois envolve a conexão entre conceitos fundamentais da Mecânica Quântica com os experimentos de RMN ou RQN (Ressonância Quadrupolar Nuclear). O grupo foi pioneiro nesta área de pesquisa, principalmente com o emprego da RMN, atendendo a uma demanda do CNPq para acelerar esta linha de pesquisa no País.

Para essa finalidade, foi estabelecida uma frutífera colaboração com colegas do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF) e do Departamento de Física da UFES. Desde 2004, apresentam enorme evolução nesta complexa área de pesquisa, com a publicação de vários artigos de relevo em revistas de alto fator de impacto e de um livro (*NMR Quantum Information Processing*, Elsevier, 2007). Além de manter o emprego da RMN, com a presença de uma aluna de doutorado, que defendeu sua tese de doutorado defesa no dia 09/06/2022, foi introduzida, de forma original e



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

inovadora, a RQN na área de Informação Quântica. Esta contribuição é de grande importância, pois os experimentos de Informação Quântica via RQN são realizados sem a necessidade de campos magnéticos intensos, que são produzidos por magnetos supercondutores, de alto custo, tanto para a aquisição quanto para a manutenção. Sem a utilização de magnetos supercondutores, os equipamentos de RQN são compactos e de baixo custo, tornando-os muito atraentes.

No segundo semestre de 2022, foi criado o Centro de Informação e Computação Quântica, com o intuito de promover o uso da Computação Quântica e integrar pesquisadores e estudantes de diferentes áreas do conhecimento, destacando Ciência da Computação e Engenharia Elétrica. De modo a promover o uso da Computação Quântica, foram disponibilizados um de seus espectrômetros de RMN para uso como um Computador Quântico, no mesmo estilo dos computadores quânticos já disponibilizados por grandes empresas. Para essa finalidade, estão consolidando uma interface que traduz o algoritmo quântico a ser implementado pelo usuário do nosso Computador Quântico no experimento de RMN a ser realizado. [A esse nosso computador quântico, demos o nome de "Gatinho Feio"](#).

1.1 Produção científica

Artigos publicados

- 1) Consuelo-Leal, A.; Araujo-Ferreira, A. G.; Vidoto, E. L. G.; Lucas-Oliveira, E.; Bonagamba, T. J.; Aucçaise, R.; *NMR Hamiltonian as an effective Hamiltonian to generate Schrodinger's cat states*; Quantum Information Processing; **21**, **2022**. **(Projeto LEAR)**
- 2) Novotny, E. H.; de Oliveira-Silva, R.; Mattos, B. B.; Rech, I.; Galvosas, P.; Bonagamba, T. J.; *Study of zeolite anti-caking effects for fertilisers by H-1 low-field NMR*; Journal of Magnetic Resonance; **342**, **2022**. **(Colaboração com Embrapa-Solos e University of Wellington – New Zealand)**
- 3) Lucas-Oliveira, E.; Barsi-Andreeta, M.; Neumann, R. F.; Trevizan, W. A.; Steiner, M. B.; Bonagamba, T. J.; *Micro-computed tomography of sandstone rocks: Raw, filtered and segmented datasets*; Data in Brief; **41**, **2022**. **(Colaboração com Cnpes/Petrobras e IBM)**
- 4) Lucas-Oliveira, E.; Marassi, A. G.; Araujo-Ferreira, A. G.; Vidoto, E. L. G.; Amorim, A. D. F.; Trevizan, W. A.; Bonagamba, T. J.; *Mechanically Oscillating Sample under magnetic field gradients: MOS-NMR*; Journal of Magnetic Resonance Open; **12-13**, 100084, **2022**. **(Colaboração com Cnpes/Petrobras)**

Artigos submetidos

- 1) Morais, M. M.; Lucas-Oliveira, E.; Bonagamba, T. J.; Aum, P. T. P.; Lucas, C. R. S.; Silva, D. N. S.; Fortulan, C. A.; *Fabrication and petrophysical characterization of artificial carbonate rocks with multiscale porosity sintered in a CO₂ atmosphere*; Journal of Petroleum Science and Engineering, **2022**. **(Colaboração com Cnpes/Petrobras, EESC/USP e LCPetro/UFGA)**
- 2) Uliana, J. H.; Braz, G. A.; Lucas-Oliveira, E.; Araujo-Ferreira, A. G.; Morais, M. M.; Trevizan, W. A.; Fortulan, C. A.; Bonagamba, T. J.; Pavan, T. Z.; Carneiro, A. A. O.; *Investigation of rock porosity using vibroacoustography*; Ultrasonics, **2022**. **(Colaboração com Cnpes/Petrobras, EESC/USP e FFCLRP/USP)**
- 3) Consuelo-Leal, A.; Araujo-Ferreira, A. G.; Lucas-Oliveira, E.; Bonagamba, T. J.; Aucçaise, R.; *NMR Relaxation by Redfield equation in a spin system I = 7/2*; Journal of Magnetic Resonance, **2022**. **(Projeto LEAR)**
- 4) Ferreira, M. E.; Del Grande, M.; Ferreira, R. N. B.; Silva, A. F.; Silva, M. N. P.; Tirapu-Azpiroz, J.; Lucas-Oliveira, E.; Araujo-Ferreira, A. G.; Soares, R.; Eckardt, C. B.; Bonagamba, T. J.; Steiner, M. B.; *Full scale, microscopically resolved tomographies of sandstone and carbonate rocks augmented*



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

by experimental porosity and permeability values; Nature Scientific Data **2022. (Colaboração com IBM)**

5) Lucas-Oliveira, E.; Jacomo, M. H.; Marassi, A. G.; Trindade, R. I. F.; Bonagamba, T. J.; *Study of the correlation between Magnetic Susceptibility and NMR Relaxation using T_2 filtered and T_1 weighted CPMG*; Journal of Petroleum Science and Engineering, **2022. (Colaboração com IAG/USP)**

1.2 Orientações

Iniciações Científicas concluídas

Edgar Salgado Silva

Projeto: “*Estudo e Utilização de Ferramentas de Perfilagem de Petróleo por RMN*”

Agência financiadora: ANP/Petrobras/Cenpes

Início: 06/2021

Final: 12/2022

João Octávio Kùl

Projeto: “*Estudo e Utilização de Ferramentas de Perfilagem de Petróleo por RMN*”

Agência financiadora: ANP/Petrobras/Cenpes

Início: 06/2021

Final: 12/2022

Mestrados em andamento

João Rafael Florentino Silva

Projeto de Mestrado: “*Avaliação da permeabilidade de rochas reservatório de petróleo através de técnicas de RMN – desenvolvimento de instrumentação*”

Agência financiadora: Fine Instrument Technology - FIT

Início: 02/2020

Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais - EESC/USP

Felipe Pereira Alves

Projeto de Mestrado: “*Estudo de Meios Porosos por RMN com o emprego de magnetos unilaterais*”

Agência financiadora: ANP/Petrobras/Cenpes

Início: 08/2021

Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais - EESC/USP

Doutorado em andamento

Ruan Felipe de Oliveira Neves

Projeto de Doutorado: “*Processamento de Séries Temporais Complexas – aplicações em RMN*”

Agência financiadora: sem bolsa

Início: 07/2021

Programa de Pós-Graduação em Física do IFSC/USP – Física Computacional

Doutorado finalizado

Adriana Consuelo Leal

Projeto de Doutorado: “*Geração de estados gato de Schrödinger e estudo da relaxação nuclear em spins quadrupolares via RMN*”

Agência financiadora: CNPq

Início: 02/2018

Final: 09/06/2022

Programa de Pós-Graduação em Física do IFSC/USP – Física Básica



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Pós-doutorados em andamento

Agide Gimenez Marassi

Projeto: “Estudo de rochas reservatório de petróleo por RMN com a utilização de magnetos convencionais e unilaterais”

Agência financiadora: ANP/Petrobras/Cenpes

Início: 06/2021

Arthur Gustavo de Araújo Ferreira

Projeto: “Estudo de rochas reservatório de petróleo por RMN com a utilização de magnetos convencionais e unilaterais”

Agência financiadora: ANP/Petrobras/Cenpes

Início: 12/2020

Pós-doutorado finalizado

Éverton Lucas de Oliveira

Projeto: “Estudo de rochas reservatório de petróleo por RMN com a utilização de magnetos convencionais e unilaterais”

Agência financiadora: ANP/Petrobras/Cenpes

Início: 12/2020

Final: 12/2022

Obs: finalizado para a realização de (i) um pós-doc na KU-Leuven-Bélgica e, na sequência, (ii) o início de atividades no LNLS/Sirius

2 ATIVIDADES DE ENSINO

2.1 Graduação

- Laboratório de Física Geral I – Engenharia Aeronáutica (primeiro semestre)

Obs.: Foi agraciado com o Certificado de Excelência, da Secretaria Acadêmica da Engenharia Aeronáutica – SAAERO, por ter recebido a avaliação de melhor professor dentre todos os docentes do primeiro semestre da Turma de Engenharia Aeronáutica.

- Laboratório de Física Geral II – Engenharia Aeronáutica (segundo semestre)

Obs.: Ainda não recebeu a avaliação final da Secretaria Acadêmica da Engenharia Aeronáutica – SAAERO para este curso, porém, prevaleceram os bons comentários já recebidos anteriormente.

Desde o primeiro semestre de 2019, o docente tem recebido Certificados de Excelência das mãos das alunas e dos alunos ingressantes da Engenharia Aeronáutica.

Nos dois cursos acima citados, sob sua coordenação e em parceria com docentes do Departamento de Engenharia Aeronáutica – EESC/USP e Departamento de Engenharia Mecânica – Unesp/Bauru, são oferecidas aulas especiais extras à distância sobre tópicos de física dos cursos associados a temas de relevo da engenharia aeronáutica, para estimular os alunos nas aulas de física. Entre os temas, destacamos: (i) medidas físicas / sensores /cockpit de um avião, (ii) giroscópio / aviônica, (iii) ressonância mecânica / flutter e (iv) expansão adiabática de gases / motores de combustão interna / turbinas de avião.

<https://www2.ifsc.usp.br/portal-ifsc/workshop-a-fisica-e-a-aeronautica-reune-estudantes-e-professores/>

- Contribuições para a Disciplina “Direcionamento Acadêmico II”:

Duas palestras apresentadas sob o tópico “USP & Sociedade: Ações de lideranças do IFSC/USP que promoveram desenvolvimento científico e socioeconômico (presencial)”, para Alunos do



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Bacharelado em Física – IFSC/USP, 23/09/2022, e para Alunos do Bacharelado em Física Computacional, 30/09/2022.

Comentários emitidos pelos alunos do Bacharelado em Física, enviado pelo Prof. Paulo Miranda (Coordenador – Atividades Direcionamento Acadêmico II):

“No formulário que os alunos têm que enviar sobre as palestras, incluindo um resumo e comentários sobre a mesma, a grande maioria gostou muito da sua apresentação, com destaque para a parte histórica da USP e IFSC, que foi muito motivadora e que trouxe a eles um senso de pertencimento e responsabilidade. Vários inclusive disseram que foi a melhor palestra dentre todas das duas disciplinas (este semestre e o anterior). Alguns comentaram que poderia ter deixado um pouco mais de tempo para falar da sua pesquisa em RMN, mas creio que em particular neste semestre isso não foi um problema, já que o Schneider falou sobre RMN na semana anterior...”

2.2 Pós-graduação

Nada a declarar

2.3 Cursos extracurriculares

Nada a declarar

3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E SERVIÇOS À COMUNIDADE

- Proposição e Coordenação do Projeto “Judô na EEFERP/USP”, dedicado ao desenvolvimento do esporte de alto rendimento, com a integração entre a Ciência do Esporte e a Prática Esportiva, através da Avaliação Multidisciplinar de Atletas de Alto Rendimento:

<https://www.paulistano.org.br/noticias/judo-realiza-encontro-de-treinadores-em-convenio-a-usp-eefe-ribeirao-preto/>

Obs. 1: O projeto de colaboração entre a EEFERP/USP e o Club Athletico Paulistano (tema da matéria acima indicada) foi consolidado por docentes da EEFERP/USP. O papel do docente foi estímulo à integração entre as equipes e a coordenação das atividades.

Obs. 2: O docente atua no Judô desde o final da década de 1960, tendo participado em competições da Federação Paulista de Judô (FPJ) até o final da década de 1970, quando ingressou no IFQSC/USP como estudante de Graduação. Atualmente, é Faixa Preta (2º Dan) pela FPJ e Confederação Brasileira de Judô (CBJ), sendo oficialmente credenciado em ambas as instituições.

4 PARTICIPAÇÃO EM COLEGIADOS E ENCARGOS ADMINISTRATIVOS

- Coordenador do Centro de Inovação da USP – Complexo de São Carlos
- Membro do Programa Institucional de Internacionalização CAPES/PrInt, conduzido pela PRPG/USP. Coordeno a área de “Earth & Space”.
- Membro nato do Conselho do Departamento de Física e Ciência Interdisciplinar do IFSC/USP.
- Membro nato da Congregação do IFSC/USP.
- Membro da Congregação da EEFERP/USP. (Atividade concluída em 06/2022)

5 RECURSOS FINANCEIROS – PROJETOS DE PESQUISA

- Cenpes/Petrobras/ANP: Estudo de Rochas Reservatório por Ressonância Magnética Nuclear - 1.

Valor: R\$ 1.798.567,79.



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Vigência: 01/12/2020 a 30/03/2023 (com extensão solicitada para 25/11/2023)

- Bolsa de Produtividade CNPq – 1B (aprovada no último edital do CNPq para mais quatro anos)

6 OUTRAS PARTICULARIDADES

- Um dos 4 Guest Editors (1 do Brasil, 2 da Argentina e 1 do México) do [Journal of Magnetic Resonance Open](#) Special Issue intitulado “[Magnetic Resonance in Latin America](#)”, com publicações ao longo de 2022 e 2023.

- **Palestras apresentadas**

“RMN e Rochas Digitais: Uma parceria de sucesso para o estudo meios porosos e fluidos que os permeiam - Aplicações na área de Petróleo (online)”, Cenpes/Petrobras, 01/02/2022.

“Judô na EEFERP/USP – Aproximação entre a Universidade e a Sociedade através do Esporte (presencial)”, Club Athletico Paulistano, 05/05/2022.

“Mechanically oscillating samples in the presence of magnetic field gradients produced by single-sided magnets (online)”, Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche – GIDNMR, 08/06/2022, <http://www.gidrm.org/index.php/activities/workshops/2022-workshops/gidrm-day-low-field-nmr-mri-of-porous-media-methods-and-applications>

“Descobertas e Trabalhos de Física que diretamente criaram desenvolvimento (online)”, 74ª Reunião Anual da SBPC (por indicação da SBF), 25/07/2022.

Obs: Essa palestra foi convidada pela SBF para representá-la na 74ª Reunião Anual da SBPC. (<https://sbfisica.org.br/v1/sbf/participacao-da-sbf-na-74a-reuniao-anual-da-sbpc/>)

“NMR signals from mechanically oscillating samples in a single-sided magnet: a simple Logging-While-Drilling equipment (online)”, 15th International Bologna Conference on Magnetic Resonance in Porous Media (MRPM15). Hangzhou, China, 23/08/2022. (<https://www.mrpm2022.org/>)

“NMR signals from mechanically oscillating samples in the presence of magnetic field gradients: A simple Logging-While-Drilling simulator (online)”, 5th Brazil Interpore Chapter Meeting, 01/08/2022. (<https://interpore2022br.ufrn.br/>)

“Da exploração de petróleo - realidade - ao armazenamento de CO₂ – anseio (online)”, LCPetro/UFGA, 31/08/2022.

“Universidade & Sociedade - Devemos interagir com a Sociedade de modo contribuir para o seu Desenvolvimento? (presencial)”, IFUSP – Colóquios, 29/09/2022.

“USP & Sociedade: Ações que promoveram desenvolvimento socioeconômico através da Educação e da Ciência (presencial)”, IAG/USP - palestra de abertura do SIICUSP, 26/10/2022.

“A Pesquisa desenvolvida na Academia pode contribuir para o Desenvolvimento e Inovação no âmbito da Indústria do O&G, incluindo aspectos ambientais? Que TRL precisamos alcançar? (presencial)”, 11º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo, Gás e Biocombustíveis – PDPETRO – UFGA, 10/11/2022. (<http://www.portalabpg.org.br/11pdpetro/>)

Obs: Essa palestra fez parte da abertura do evento, que seguiu a apresentação da Superintendente Adjunta de Pesquisa e Desenvolvimento da ANP. Este fato propiciou importante aproximação da USP à ANP, incluindo a proposição de uma Litoteca, também relatada neste relatório.

- Revisão de artigos para revistas indexadas



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Journal of Magnetism and Magnetic Materials

Journal of Magnetic Resonance Open

The Society of Petroleum Engineers (SPE) Journal

- Avaliação de projetos no Brasil e exterior

Mitacs, a catalyzing force in the Canadian innovation ecosystem

Fondo para la Investigación Científica y Tecnológica (FONCYT), Argentina

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina

FAPESP

CNPq

CAPES/PRInt

Conclusões do docente:

“Tenho procurado contribuir ao crescimento da USP realizando, sem medir esforços, atividades de ensino, pesquisa, desenvolvimento e inovação, gestão, extensão e internacionalização, estimulando a aproximação da Academia à Sociedade, sempre atuando com o fundamental princípio de que a Universidade deve atuar como um todo e não como um conjunto de indivíduos e de instituições.

Na área de ensino, tenho oferecido disciplinas de Laboratório de Física Geral I e II para alunos do Curso de Engenharia Aeronáutica, desde o segundo semestre de 2018. Tenho me empenhado a oferecer cursos estimulantes para que esses alunos fiquem motivados, considerando que são ingressantes e ainda não têm muito contato com docentes do Departamento de Engenharia Aeronáutica (SAA) - EESC/USP. Para esta finalidade, incluo temas de interesse da aeronáutica relacionados com os tópicos de física estudados. De forma complementar, em parceria com professores do SAA, oferecemos aulas especiais que associam física à aeronáutica. Como resultado, tenho recebido dos alunos ingressantes, através da Secretaria Acadêmica da Engenharia Aeronáutica, certificados de excelência por ter sido avaliado como o melhor professor desses alunos, desde o primeiro semestre de 2019 até o primeiro semestre de 2022. Ainda não recebi a avaliação referente ao segundo semestre de 2022, mas tenho recebido excelentes mensagens dos alunos.

<https://www2.ifsc.usp.br/portal-ifsc/workshop-a-fisica-e-a-aeronautica-reune-estudantes-e-professores/>

Na área de pesquisa, tenho atuado em duas linhas principais dentro da área de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), Informação Quântica (IQ) e Ciência & Engenharia do Petróleo – Meios Porosos (CEPMP), com maior destaque para a segunda.

No caso da CEPMP, temos alcançado bons resultados, sempre buscando parcerias com instituições de ensino e pesquisa e empresas de relevo na área. Para o estabelecimento de uma rede de colaborações, temos visitado essas instituições e criamos a série de Workshops intitulada “LEAR Workshop Series on Porous Media”, com início em 2016, já com 13 edições realizadas com sucesso. (<https://wpm-lear.weebly.com/>)

Em função dos resultados alcançados na área de CEPMP, tenho sido convidado como palestrante em eventos internacionais e nacionais, tal como acima relatado, destacando as palestras apresentadas, tanto no âmbito internacional, no 15th International Bologna Conference on Magnetic Resonance in Porous Media (MRPM15), quanto no âmbito nacional, no 11^o Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo, Gás e Biocombustíveis. Destaco também a prestigiosa escolha da minha pessoa pela Sociedade Brasileira de Física para representá-la na 74^a Reunião Anual da SBPC.



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Finalmente, fui honrosamente convidado ser membro da equipe de Guest Editors for a [JMR-Open Special Issue on "Magnetic Resonance in Latin America"](#).

Atualmente, temos projetos em andamento com colaboradores do (i) Cenpes/Petrobras (com início em 01/12/2020, no valor de R\$ 1.798.567,79), envolvendo medidas de RMN em condições de perfuração de poços de petróleo e considerado de alta prioridade pela Petrobras e da (ii) empresa FIT - Fine Instrument Technology (com início 02/02/2022, sem recursos envolvidos), envolvendo o desenvolvimento, construção e comercialização de um equipamento de RMN e software para processamento de sinais dedicados ao estudo de meios porosos.

No caso de gestão, tenho atuado como Coordenador do Centro de Inovação da USP – InovaUSP – Complexo São Carlos, com início em 2022, e membro do Grupo Gestor do Programa de Internacionalização da USP - CAPES/PRInt (PRPG/USP), com início em 2019. Também prontamente atendi em 2022, por solicitação da PRPG/USP, a tarefa de oferecer apoio a vários Programas de Pós-Graduação (não limitados à área de Física) na redação de recursos decorrentes da avaliação não positiva dos Comitês Assessores da CAPES.

Enfim, julgo estar fazendo meu papel acadêmico com ações de ensino, pesquisa, extensão, gestão e internacionalização com mentalidade aberta, reconhecendo o papel de Universidade para o desenvolvimento socioeconômico do País, respeitando e integrando todas as áreas do conhecimento.

Com base nas informações apresentadas, entendo estar desempenhando adequadamente minhas funções regulares na USP, que ocorrem em perfeita comunhão com as simultâneas, já que, na minha forma de atuar, não se distinguem, pelo contrário, se harmonizam para o bem de nossa Universidade e da Sociedade."

Os dados dos docentes com credenciamento CERT vigente em 2022 e que não exerceram atividades simultâneas estão disponíveis para consulta na Plataforma Lattes do CNPq, a saber:

ANA PAULA ULIAN DE ARAÚJO	http://lattes.cnpq.br/5183458350445779 *
ILANA LOPES B. CUNHA CAMARGO	http://lattes.cnpq.br/4104096171600845 *
JOSÉ FERNANDO FONTANARI	http://lattes.cnpq.br/9476407358926075 *
LUIZ VITOR DE SOUZA FILHO	http://lattes.cnpq.br/7784197682091397 *
OTAVIO HENRIQUE THIEMANN	http://lattes.cnpq.br/4933022274560322 *
RICHARD CHARLES GARRATT	http://lattes.cnpq.br/1405100203133067 *

*Domínios da Plataforma Lattes do CNPq vigentes em 09/01/2023.



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

COMISSÃO ESPECIAL DE REGIMES DE TRABALHO

Segunda parte

Docente: Adriano Defini Andricopulo		
Parecer CERT número: 660/2021		Credenciamento Válido: 23/04/2021 a 23/04/2023
Instituição: DNDi (42230M)		
Atividade: Coordenação		
Período da Atividade 01/01/2022 a 31/12/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual SEM percepção de remuneração	Artigo 19 - 20 – 21 19, § 3º

Docente: Alberto Tannús		
Parecer CERT número: 95/2020 e 52/2022		Credenciamento Válido: 08/03/2020 a 08/03/2022 e 08/03/2022 a 08/03/2024
Instituição: Universidade de Minnesota (41778 M)		
Atividade: Coordenação		
Período da Atividade 01/01/2022 a 31/12/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual SEM percepção de remuneração	Artigo 19 - 20 – 21 19, § 3º

Docente: Alberto Tannús		
Parecer CERT número: 95/2020 e 52/2022		Credenciamento Válido: 08/03/2020 a 08/03/2022 e 08/03/2022 a 08/03/2024
Instituição: Universidade de Minnesota (41778 M)		
Atividade: Assessoria		
Período da Atividade 01/01/2022 a 31/12/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual 0,5 (meia) hora semanal	Artigo 19 - 20 – 21 20

Docente: Alberto Tannús		
Parecer CERT número: 95/2020 e 52/2022		Credenciamento Válido: 08/03/2020 a 08/03/2022 e 08/03/2022 a 08/03/2024
Instituição: CITESC (42241 M)		
Atividade: Coordenação		
Período da Atividade 01/01/2022 a 31/12/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual SEM percepção de remuneração	Artigo 19 - 20 – 21 19, § 3º

Docente: Eduardo Ribeiro Azevêdo		
Parecer CERT número: 1367/2021		Credenciamento Válido: 20/10/2021 a 19/10/2023
Instituição: PETROBRAS (1013991 M)		
Atividade: Coordenação		
Período da Atividade 01/01/2022 a 31/12/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual SEM percepção de remuneração	Artigo 19 - 20 – 21 19, § 3º



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Docente: Hellmut Eckert		
Parecer CERT número: 1388/2020 e 1421/2022	Credenciamento Válido: 22/11/2020 a 22/11/2022 e 23/11/2022 a 22/11/2024	
Instituição: Nippon Electric Glass Co., Ltd. (1013109 P)		
Atividade: Coordenação		
Período da Atividade 01/01/2022 a 31/12/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual SEM percepção de remuneração	Artigo 19 - 20 – 21 19, § 3º

Docente: Hellmut Eckert		
Parecer CERT número: 1388/2020 e 1421/2022	Credenciamento Válido: 22/11/2020 a 22/11/2022 e 23/11/2022 a 22/11/2024	
Instituição: Nippon Electric Glass Co., Ltd. (1013109 P)		
Atividade: Assessoria		
Período da Atividade 01/01/2022 a 31/12/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual 01 (uma) hora semanal	Artigo 19 - 20 – 21 20

Docente: Rafael Victório Carvalho Guido		
Parecer CERT número: 598/2020 e 709/2022	Credenciamento Válido: 28/08/2020 a 27/08/2022 e 27/08/2022 a 27/08/2024	
Instituição: CELLCO BIOTEC DO BRASIL LTDA (1011976 M)		
Atividade: Coordenação		
Período da Atividade 01/01/2022 a 26/04/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual SEM percepção de remuneração	Artigo 19 - 20 – 21 19, § 3º

Docente: Rafael Victório Carvalho Guido		
Parecer CERT número: 598/2020 e 709/2022	Credenciamento Válido: 28/08/2020 a 27/08/2022 e 27/08/2022 a 27/08/2024	
Instituição: MMV (42230M)		
Atividade: Coordenação		
Período da Atividade 01/01/2022 a 31/12/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual SEM percepção de remuneração	Artigo 19 - 20 – 21 19, § 3º

Docente: Rafael Victório Carvalho Guido		
Parecer CERT número: 598/2020 e 709/2022	Credenciamento Válido: 28/08/2020 a 27/08/2022 e 27/08/2022 a 27/08/2024	
Instituição: MMV e CEPEM (41659 M)		
Atividade: Coordenação		
Período da Atividade 01/01/2022 a 31/12/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual SEM percepção de remuneração	Artigo 19 - 20 – 21 19, § 3º



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, salas 107 a 110 - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411
e-mail: cert@usp.br

Docente: Rafael Victório Carvalho Guido		
Parecer CERT número: 598/2020 e 709/2022		Credenciamento Válido: 28/08/2020 a 27/08/2022 e 27/08/2022 a 27/08/2024
Instituição: Atomwise Inc. (1011509 P)		
Atividade: Coordenação		
Período da Atividade 01/01/2022 a 21/06/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual SEM percepção de remuneração	Artigo 19 - 20 - 21 19, § 3º

Docente: Rafael Victório Carvalho Guido		
Parecer CERT número: 598/2020 e 709/2022		Credenciamento Válido: 28/08/2020 a 27/08/2022 e 27/08/2022 a 27/08/2024
Instituição: DNDi (1013644 M)		
Atividade: Coordenação		
Período da Atividade 01/01/2022 a 03/10/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual SEM percepção de remuneração	Artigo 19 - 20 - 21 19, § 3º

Docente: Tito José Bonagamba		
Parecer CERT número: 1387/2020 e 1422/2022		Credenciamento Válido: 12/12/2020 a 12/12/2022 e 11/12/2022 a 11/12/2024
Instituição: PETROBRAS (1012374 M)		
Atividade: Coordenação		
Período da Atividade 01/01/2022 a 30/11/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual SEM percepção de remuneração	Artigo 19 - 20 - 21 19, § 3º

Docente: Tito José Bonagamba		
Parecer CERT número: 1387/2020 e 1422/2022		Credenciamento Válido: 12/12/2020 a 12/12/2022 e 11/12/2022 a 11/12/2024
Instituição: FIT (1014176 P)		
Atividade: Coordenação		
Período da Atividade 01/01/2022 a 31/12/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual SEM percepção de remuneração	Artigo 19 - 20 - 21 19, § 3º

Docente: Tito José Bonagamba		
Parecer CERT número: 1387/2020 e 1422/2022		Credenciamento Válido: 12/12/2020 a 12/12/2022 e 11/12/2022 a 11/12/2024
Instituição: IBM (41360 M)		
Atividade: Coordenação		
Período da Atividade 01/01/2022 a 01/09/2022	Nº de Horas semanal, semestral ou anual SEM percepção de remuneração	Artigo 19 - 20 - 21 19, § 3º



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Comissão Especial de Regimes de Trabalho
Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, 5º andar (salas 502 a 507) - São Paulo, SP
Tel: (11) 3091.2099, 3091.3410, 3091.3411

207

Processo nº - 15.1.117.76.1

Interessado – INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

Assunto - o Departamento de Física e Ciência Interdisciplinar (FCI) apresenta relatório referente ao exercício de atividades simultâneas 2022.

PARECER CERT nº 1184/2023

A CERT, em reunião de 21/08/2023, tomou conhecimento dos elementos constantes dos autos, considerando-os aprovados.

Nessas condições, o processo deverá ser encaminhado ao IFSC para conhecimento da Diretoria da Unidade e do Departamento respectivo.

CERT, 23 de agosto de 2023.

Anna Helena Reali Costa
Presidente

208



USPAssina - Autenticação digital de documentos da USP

Registro de assinatura(s) eletrônica(s)

Este documento foi assinado de forma eletrônica pelos seguintes participantes e sua autenticidade pode ser verificada através do código 63IM-6RW1-B2IC-IS5C no seguinte link: <https://portalservicos.usp.br/iddigital/63IM-6RW1-B2IC-IS5C>

Anna Helena Reali Costa

Nº USP: 2705708

Data: 25/08/2023 13:00

Perfil assinante:: Presidente da CERT