



**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](mailto: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: **2023**.

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

Data da Aprovação do Departamento: **15/03/2024 (225ª 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 2023, o Departamento teve 13 (treze) docentes com credenciamento CERT autorizados para desenvolver atividades simultâneas ao RDIDP, dos quais 08 (oito) 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 do grupo do docente tem sido fundamental para o desenvolvimento das 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. Destacam-se os Projetos Temáticos, PITE e CEPID:

(i) 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;

(ii) 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.



## 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](mailto:cert@usp.br)

(iii) Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo – FAPESP. Processo FAPESP nº 2013/07600-3. Projeto CEPID – Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos – CIBFar.

### 2. Prof. Dr. ALBERTO TANNÚS

#### 2.1 Convênio CIERMag/IFSC/USP, CMRR (Universidade de Minnesota) e NIH (National Institutes of Health)

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 06/2024).

##### 2.1.1 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 <sup>19</sup>F MRS como candidato para realizar uma medição global de pO<sub>2</sub> 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, foi montado 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 opera com o magneto apenas de cabeça de 1.5 Tesla, cuja construção faz parte das atividades de pesquisa do consórcio do qual o docente participa.

##### Resultados:

Os resultados referentes à primeira parte deste projeto podem ser avaliados através da publicação do pôster no 64º congresso ENC *Development of a Compact NMR System to Measure pO<sub>2</sub> in a Tissue-Engineered Graft* por Efrain Torres, Saurin Kantesaria, Paul Wang, Parker Jenkins, Leah Steyn, Lance DelaBarre, Taylor Froelich, Daniel Pizetta, Dimitrios Sakellariou, Alberto Tannus, Klearchos Papas, Michael Garwood. Abstract: *A tissue-engineered graft (TEG) containing islet cells could serve as a bioartificial pancreas when implanted in the forearm of diabetic patients. The bioartificial pancreas requires supplemental oxygen delivery to ensure oxygen remains within physiological levels<sup>1</sup>. To monitor its oxygen levels, TEGs contain perfluorocarbons with oxygen-sensitive R1 values<sup>2</sup>. Here we present a tabletop oxygen scanner based on 19F NMR Relaxometry. The system will be used in research and upcoming clinical trials evaluating a potential cell-based functional cure for type I diabetes.* Trabalho completo sobre o mesmo tema foi publicado no Journal of Magnetic Resonance como **Torres, E., Wang, P., Kantesaria, S., Jenkins, P., DelaBarre, L., Pizetta, D.C., Froelich, T., Steyn, L., Tannús, A., Papas, K.K. and Sakellariou, D.** *Development of a compact NMR system to measure pO<sub>2</sub> in a tissue-engineered graft.* Journal of Magnetic Resonance, 357, p.107578 (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](mailto:cert@usp.br)

Para o segundo item, foi montado o sistema de oito canais de transmissão e recepção, atualmente operando em 0.75 Tesla (30 MHz) com o magneto apenas de cabeça do CMRR em Minneapolis, cuja construção faz parte das atividades de pesquisa do consórcio do qual o professor participa.

Toda a interação com a equipe de Minnesota está sendo realizada remotamente, e cuida neste momento da atualização do espectrômetro (DMRS) e respectivo software de controle que irá 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, parâmetros intrínsecos, 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., Garwood, M.** *B1-gradient based MRI using Frequency-modulated Rabi Encoded Echoes (FREE)*. MAGNETIC RESONANCE IN MEDICINE, v. 87 (2), p. 674-685, (2022) e do pôster #5249 apresentado no ISMRM 2023 *Toward the development of a B0 gradientless MRI system: Frequency-encoded Frequency-modulated Rabi Encoded Echoes* By: **Efraim Torres, Parker Jenkins, Djaudat Idiyatullin, Lance DelaBarre, Taylor Froelich, Daniel Cosmo Pizetta, Julia Marcolan, Alberto Tannús, Michael Garwood.**

Este trabalho já é um marco de distinção entre as formas de geração de Imagens por RM COM e SEM a utilização de gradientes de 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 será possível estabelecer novos desafios de desempenho do DMRS com a possibilidade de estender o número de canais de transmissão e recepção para 16. A proposta recebeu críticas dos revisores e foi re-submetida em fevereiro de 2023.

### 3. Prof. Dr. ALESSANDRO SILVA NASCIMENTO

No ano de 2023, foram encerradas as atividades de consultoria junto à empresa BRASKEM. Nesta atividade simultânea ao RDIDP, o docente atuou como consultor da empresa em um projeto de otimização de uma enzima para um determinado processo do interesse da empresa. As atividades no escopo desta consultoria envolviam a análise da estrutura da enzima selvagem, a proposição de mutações que resultassem na melhoria da atividade desejada, a análise dos dados de atividade dos mutantes gerados pela empresa e a racionalização do efeito das mutações, frente à estrutura e função da enzima.

O processo supracitado está incluso no escopo da redução da dependência de combustíveis fósseis para a fabricação de materiais plásticos e a proposição de uma rota biotecnológica e renovável em seu lugar. Desta forma, existe uma relevância social e ambiental extremamente elevada associada ao projeto e, estas razões foram decisivas para a participação desta atividade.

Evidente que houve um ganho nas atividades como docente e pesquisador pelo fato de participar desta atividade simultânea. Neste caso em particular, é notório para o professor e para a empresa que a relação estrutura-atividade é multifatorial e, muitas vezes, difícil de racionalizar. Por outro lado, se existe a capacidade de gerar dados experimentais com um bom *throughput*, este cenário é convidativo para aplicação e desenvolvimento de ferramentas baseadas em inteligência artificial com aprendizado profundo. Durante o desenvolvimento desta atividade, foi disponibilizada pela empresa Google Deep Mind a ferramenta AlphaFold2, que revolucionou a biologia estrutural e demonstrou de forma inequívoca o potencial que as ferramentas de IA tem para esta finalidade. Nos meses seguintes, a engenharia de proteínas tem tomado outra dimensão pelo emprego 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](mailto:cert@usp.br)

ferramentas de IA generativas, novamente confirmando estes achados.

Desde então, é agregado o uso de IA em sua linha de pesquisa, ainda de forma modesta, mas visando aprender mais profundamente suas aplicações e suas limitações no escopo da biologia estrutural. No momento da escrita deste relatório, o docente possui dois alunos de iniciação científica que são bolsistas FAPESP e CNPq e que têm seus projetos focados em IA aplicada à biologia estrutura. Em parte, esta ampliação de visão acontece devido a este contato com os problemas que a empresa visava resolver no contexto da atividade simultânea.

Também é explorado a ideia do '*docking invertido*' (de ligantes) no contexto da pesquisa, como consequência do projeto desenvolvido junto à empresa. Nesta ideia, o mesmo substrato é utilizado para o *docking* em mutantes de uma mesma enzima e a energia de interação é empregada como uma forma de guia para mapear os ganhos e perdas de afinidade dos mutantes ao substrato.

Notório o entusiasmo do docente sobre as aplicações de IA na biologia estrutural ou na biologia computacional na disciplina que leciona na graduação, a disciplina de biologia molecular computacional. [Esta disciplina teve sua ementa atualizada no ano de 2013](#) e agora inclui, por exemplo, o tópico "*Introdução aos métodos de inteligência artificial em bioinformática*".

Já no final do ano de 2023 (novembro de 2023), foi iniciado o novo projeto de consultoria junto ao Instituto Vita Nova, que é uma empresa de inovação na área farmacêutica. Os primeiros encontros em 2023, foram realizados a fim de determinar alguns projetos de interesse para a empresa. Contudo, o escopo do projeto está focado no desenvolvimento de biomoléculas bioativas. Nas atividades de consultoria, e de forma alinhada aquilo já exposto acima, foi proposto à empresa o emprego de ferramentas de IA para o *design* de biomoléculas com atividade biológica. Contudo, as atividades ainda estão em fase de definição de alvos e composição da equipe de trabalho.

#### 4. Prof. Dr. ANDRE LUIS BERTELI AMBROSIO

Desde outubro de 2023, o docente desenvolve assessoria científica junto ao Laboratório Nacional de Biociências (LNBio/CNPEM), com foco em crio-microscopia eletrônica (cryo-EM) e colaboração na implementação e disseminação de técnicas avançadas em biologia estrutural; a atividade de assessoria terá duração total de 21 meses. O objetivo é apoiar o desenvolvimento de abordagens experimentais para análise de partículas biológicas isoladas e crio-tomografia em ambiente celular nativo. Estas atividades são totalmente compatíveis com aquelas que o professor realiza desde a contratação no IFSC, estão previstas no projeto acadêmico de docente e alinhadas com o plano do departamento, favorecendo o desenvolvimento do Estado de São Paulo e do Brasil nas áreas de biologia estrutural e campos correlatos. Desde a admissão no IFSC, houve uma capacitação em técnicas de fronteira ainda incipientes no país, com diversas orientações e projetos de pesquisa no tema, possuindo um artigo em revisão e contribuindo ativamente na elaboração de uma proposta na chamada atual de equipamento multiusuário FAPESP, visando à aquisição de dois microscópios eletrônicos. O plano de atividades simultâneas inclui um compromisso semanal de oito horas para consultoria presencial, supervisão e coordenação com as equipes de pesquisa, que estreita a colaboração entre IFSC e LNBio/CNPEM, e incentiva a construção de parcerias científicas, compartilhamento de conhecimento, recursos e infraestrutura. Essa cooperação fortalece as capacidades de pesquisa das instituições envolvidas e impulsiona o avanço interdisciplinar.

#### 5. 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: 30/12/2021 a 27/12/2024



## 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](mailto:cert@usp.br)

Aditivo de Escopo e Valor: R\$ 348.977,44  
Vigência: 08/11/2023 a 27/12/2024

### 6. Prof. Dr. HELLMUT ECKERT

Pelo convênio 1013109 entre USP e a empresa Nippon Electric Glass foi realizada a pesquisa colaborativa e consultoria. Neste convênio, foram feitas 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, foram pagas bolsas para uma aluna de doutorado e um aluno de mestrado. A colaboração ajuda o processo de internacionalização da instituição com o setor industrial. Além disso, é realizada pelo docente assessoria de projetos e participações em decisões sobre o financiamento deles como coordenador da Física da FAPESP.

### 7. Prof. Dr. RAFAEL VICTÓRIO CARVALHO GUIDO

#### 7.1 Medicines for Malaria Venture (MMV)

Em 2023, 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 visando o desenvolvimento de moléculas para obtenção de um candidato para estudos clínicos; e, ii) no projeto Isolados de Campo visando avaliação de novos inibidores em ensaio *ex vivo* contra isolados de *P. falciparum* e *P. vivax* em colaboração com o CEPEM. **Importante destacar que na segunda frente (Isolados de Campo) houve percepção de remuneração para as atividades de consultoria científica, avaliação de resultados e elaboração de relatórios técnicos.**

##### 7.1.1 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**

Nº convênio: 42230

Valor: US\$ 25.000,00

Vigência: 31/10/2019 a 30/10/2024

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 é composta por pesquisadores do Instituto de Química da UNICAMP, coordenados pelo Prof. Luiz Carlos Dias (pesquisador responsável), e do IFSC/USP, sob a coordenação do docente (pesquisador principal).

No projeto PITE-FAPESP foram desenvolvidas moléculas para obtenção de um candidato clínico. 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 duas séries de compostos. Entre eles destacam-se os compostos apresentados na Tabela 1.



# 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](mailto:cert@usp.br)

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

Properties	MMV1812065	MMV1964521
Molecular weight - g/mol	405.54	300
PF3D7 IC <sub>50</sub> - μM	0.53	0.032
NF54 IC <sub>50</sub> - μM	0.85	0.024
Toxicity-Hep G2 cells 48 h IC <sub>50</sub> - μM	>25	>25
LogD	1.5	0.34
Human mics - Clint μL/min/mg	35	< 3.5
Rat-heps - Clint μL/min/10e6 cells	4.5	< 1.2
Kinetic Solubility PBS - (pH = 7.4) μM	186	171.6
hERG-IC <sub>50</sub> - μM	8.05	> 30
CYP2D6 & CYP3A4 %inhibition @ 1 μM	> 75	ND
Rate of killing in FACS PRR	Faster than CQ	Faster than CQ
Cross resistance (CR) and MOA	No CR and Novel MOA	No CR and Novel MOA
Life stage activity	Blood only	Blood only

## 7.1.2 Isolados de Campo

**Atividade desenvolvida em parceria com colaboradores da MMV.**

**Título: Testar a sensibilidade a fármacos com base na inibição da maturação de esquizontes em relação a controles livres de fármaco**

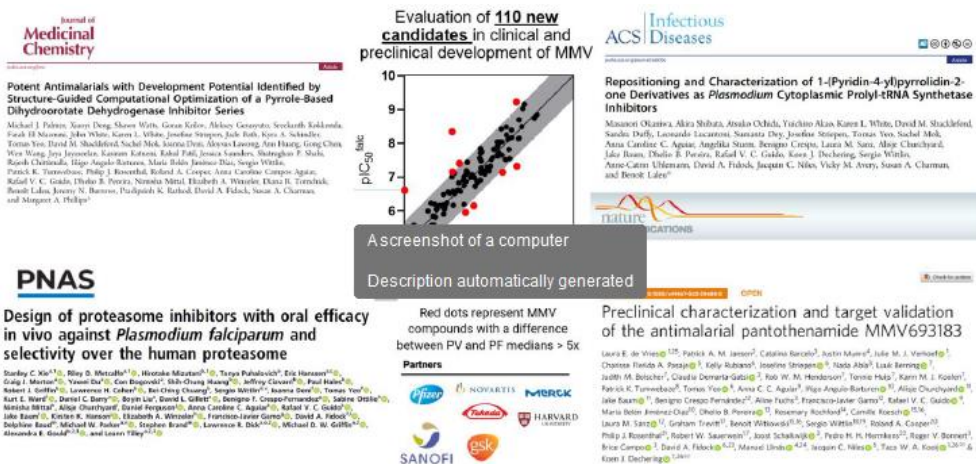
Nº convênio: 41659

Valor: US\$ 40.000,00

Vigência: 01/09/2017 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 2023 (Comitê de Ética do Centro de Pesquisa em Medicina Tropical-CEPEM-Rondonia - CAAE 61442416.7.0000.0011). De fato, o laboratório do docente é um Centro de Excelência da MMV para a avaliação de candidatos a fármacos para a malária, sendo o único no mundo capaz de realizar ensaios para determinação de eficácia contra o *Plasmodium vivax*.

Até o momento, foram avaliados a atividade inibitória de mais de 100 candidatos a fármacos para a malária, provenientes de diversos centros de pesquisas e indústrias farmacêuticas (Figura 1). Esses ensaios têm favorecido o estabelecimento de colaborações internacionais cujos os resultados têm sido publicados nos principais periódicos científicos com seletiva política editorial (Figura 1).





## 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](mailto:cert@usp.br)

**Figura 1.** Relação entre a atividade inibitória determinado em *P. falciparum* e *P. vivax*. Artigos publicados em periódicos relevantes decorrentes das colaborações internacionais com os centros de pesquisa e indústrias farmacêuticas.

### 8. Prof. Dr. TITO JOSÉ BONAGAMBA

#### Projetos desenvolvidos em 2023

As atividades simultâneas apresentadas neste item estão associadas àquelas desenvolvidas no grupo que o docente coordena 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 básicas e aplicadas 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 egressos, tanto na academia como em indústrias/empresas. Como exemplo de empregos em indústrias/empresas, há estudantes (ES) ou egressos (EG) atuando ou que atuaram no Cenpes/Petrobras (EG/Dr. – ativo), [Engemasa](#) (EG/Dr. – finalizado), [Inbracel](#) (EG/Dr. – ativo), [FIT](#) (ES/Mestrando – ativo), [SEEK](#) (EG/Dr. – ativo), Samsung (EG/Mestre – finalizado) e Philips (EG/Mestre – ativo). Enquanto a [Schlumberger](#) manteve seu centro de pesquisa no Brasil, houve um egresso (EG/Dr. – finalizado) atuando na empresa, com sucesso.

No caso de atuação na academia, temos dois egressos (EG/Dr. – ativos) atuando no Weizmann Institute of Science – Israel, sendo um contratado como *Senior Intern* e outro como pós-doc, e mais um egresso trabalhando na KU Leuven – Bélgica, contratado para atuar em pesquisa e desenvolvimento.

Temos também um egresso atuando no CNPEM/LNLS – Linha Mogno (EG/Dr. – ativo)

#### **Atividade desenvolvida em parceria com colaboradores do Cenpes/Petrobras, com apoio da 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 24/03/2024

**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 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 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



## 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](mailto:cert@usp.br)

prestadoras de serviços de petróleo, foi desenvolvido, 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 há no laboratório, 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, foi desenvolvido 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. Assim, através de modelagem e processamento desses dados, é possível tornar 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 introduzidas duas novas atividades no projeto: 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, é possível ter mais uma técnica experimental 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, há uma 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: 21/03/2022 a 20/09/2023

**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.

**Observação: Projeto de desenvolvimento e construção do equipamento concluído, com o lançamento do produto do mercado em setembro de 2023, após análise e liberação pela**



## 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](mailto:cert@usp.br)

**AUSPIN. Este evento contou com a presença do Diretor de Desenvolvimento Científico e Tecnológico da FINEP, Carlos Alberto Araújo de Carvalho Filho.**

**Atividade em parceria com colaboradores Saint-Gobain do Brasil Produtos Industriais e para Construção LTDA.**

**Título: Estudo por RMN do mecanismo de secagem de diferentes formulações de argamassas utilizadas na construção civil.**

Valor: R\$ 150.000,00 (para custeio e uma bolsa de mestrado)

**Observação: Tito J. Bonagamba não receberá remuneração.**

Vigência: 07/12/2023 a 06/12/2025

**Resumo:** Neste projeto, serão desenvolvidas e aplicadas técnicas de RMN para o estudo do mecanismo de secagem de diferentes formulações de argamassas utilizadas na construção civil.

### 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. A produtividade científica tem sido significativa, bem como seu impacto internacional.

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.

**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, com base em seu projeto acadêmico, tem garantido que as atribuições do RDIDP de Ensino, Pesquisa e Extensão dos docentes



## 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](mailto:cert@usp.br)

credenciados e em exercício simultâneo sejam realizadas de forma plena e satisfatória. Portanto, as atividades simultâneas desenvolvidas representam um excelente retorno à sociedade, com base na ciência, tecnologia e inovação.

### 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-DEP/ENTR - NACIONAL

CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha; RIGHETTO, Gabriela Marinho; **ANDRICOPULO, Adriano Defini**. Researchers find compound that combats multidrug-resistant bacteria in less than one hour. [Depoimento a Ricardo Muniz]. Agência FAPESP, São Paulo, 17 maio 2023. online.

###### ARTIGO DE PERIÓDICO - INTERNACIONAL

CARMO, Paulo Ricardo Viviurka do; MARCACINI, Ricardo Marcondes; VALLI, Marília; SILVA-SILVA, João Victor; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; PILON, Alan Cesar; BOLZANI, Vanderlan da Silva; **ANDRICOPULO, Adriano Defini**; MARX, Edgard. Development of a novel chemoinformatic tool for natural product databases. Future Drug Discovery, London, v. 5, n. 2, p. 1-11, Sept. 2023.

GÓMEZ-GARCÍA, Alejandro; JIMÉNEZ, Daniel A. Acuña; ZAMORA, William J.; BARAZORDA-CCAHUANA, Haruna Luz; FUMAGALLI, Miguel Angel Chávez; VALLI, Marília; **ANDRICOPULO, Adriano Defini**; BOLZANI, Vanderlan da Silva; OLMEDO, Dionisio Antonio; SOLIS, Pablo N.; NUÑEZ, Marvin J.; PÉREZ, Johny Roberto Rodríguez; VALENCIA-SÁNCHEZ, Hoover Albeiro; HERNÁNDEZ, Héctor Fabio Cortés; MEDINA-FRANCO, José Luis. Navigating the chemical space and chemical multiverse of a Unified Latin American Natural Product Database: LANaPDB. Pharmaceuticals, Basel, v. 16, n. 10, p. 1388-1-1388-21, Oct. 2023. Fator de Impacto: 4,600

REZENDE JUNIOR, Celso de Oliveira; MARTINEZ, Pablo David Grigol; FERREIRA, Rafael Augusto Alves; KOOVITS, Paul John; SOARES, Bruna Miranda; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; DUARTE, Simone Michelin; CHELUCCI, Rafael Consolin; **ANDRICOPULO, Adriano Defini**; MATHEEUSSEN, An; VAN PELT, Natascha; CALJON, Guy; MAES, Louis; CAMPBELL, Simon; KRATZ, Jadel Muller; MOWBRAY, Charles E.; DIAS, Luiz Carlos. Hit-to-lead optimization of a 2-aminobenzimidazole series as new candidates for Chagas disease. European Journal of Medicinal Chemistry, Issy-les-Moulineaux, v. 246, p. 114925-1-114925-10 + supplementary data, Jan. 2023. Fator de Impacto: 6,700

RIGHETTO, Gabriela Marinho; LOPES, José Luiz de Souza; BISPO, Paulo José Martins; ANDRÉ, Camille; SOUZA, Julia Medeiros; **ANDRICOPULO, Adriano Defini**; BELTRAMINI, Leila Maria; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha. Antimicrobial activity of an Fmoc-Plantaricin 149 derivative peptide against multidrug-resistant bacteria. Antibiotics, Basel, v. 12, n. 2, p. 391-1-391-27, Feb. 2023. Fator de Impacto: 4,800

SILVA, Thiago Sabino da; SOUZA, Matheus da Silva; **ANDRICOPULO, Adriano Defini**; COELHO, Fernando Antonio Santos. Discovery of indolizine lactones as anticancer agents and their optimization through late-stage functionalization. RSC Advances, Cambridge, UK, v. 2023, n. 29, p. 20264-20270 + supplementary information: 1-128, 2023. Fator de Impacto: 3,900

SOUZA, Márcia Maria de; CENCI, Arthur Ribeiro; TEIXEIRA, Kerolain Faoro; MACHADO, Valkiria; MENDES, Majory Christina Garcia; GONÇALVES, Ana Elisa; DALMAGRO, Ana Paula; CAZARIN, Camila André; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; OLIVEIRA, Aldo Sena de; **ANDRICOPULO,**



## 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](mailto:cert@usp.br)

**Adriano Defini.** DYRK1A inhibitors and perspectives for the treatment of Alzheimer's disease. *Current Medicinal Chemistry*, Sharjah, v. 30, n. 6, p. 669-688, 2023. Fator de Impacto: 4,100

FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; **ANDRICOPULO, Adriano Defini.** Empowering neglected tropical disease drug discovery with translational medicinal chemistry. [Editorial]. *Future Medicinal Chemistry*, London, v. 15, n. 12, p. 1015-1017, June 2023. Fator de Impacto: 4,200

### CURADORIA - NACIONAL

**ANDRICOPULO, Adriano Defini** (cur); TROSSINI, Gustavo Henrique Goulart (cur); NONATO, Maria Cristina (cur); NASCIMENTO, Alessandro Silva (cur); EMERY, Flavio da Silva (cur); DIAS, Marcio Vinicius Bertacine (cur); PARISE FILHO, Roberto (cur). *Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry - BrazMedChem*, 11. Salvador: Universidade Federal da Bahia - UFBA, 2023. Disponível em: <https://brazmedchem.org/2023/organization/>. Acesso em: 10 ago. 2023.

### EDITOR DE PERIÓDICO - INTERNACIONAL

ZHOU, Jia (ed); **ANDRICOPULO, Adriano Defini** (ed); FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes (ed); GARCIA, Célia Regina da Silva (ed). *Current Topics in Medicinal Chemistry*. Sharjah: Bentham Science, 2023. Fator de Impacto: 3,400

### MONOGRAFIA/LIVRO - NACIONAL

**ANDRICOPULO, Adriano Defini**; MENDJOUD, Bolivar Soares; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; BORGES FILHO, Raul. Saúde e bem-estar. In: **ANDRICOPULO, Adriano Defini**; BONAGAMBA, Tito José; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; BASILIO, Thamiris Cristina Costa; BARBUTO, Vanessa Soriano, (eds). *Ciência, tecnologia, inovação e o futuro de São Carlos*. São Carlos: Fundação Pró-Memória de São Carlos - FPMSC, 2023. cap. 3, p. 40-49.

### MONOGRAFIA/LIVRO-ED/ORG - NACIONAL

**ANDRICOPULO, Adriano Defini** (ed); BONAGAMBA, Tito José (ed); FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes (ed); BASILIO, Thamiris Cristina Costa (ed); BARBUTO, Vanessa Soriano (ed). *Ciência, tecnologia, inovação e o futuro de São Carlos*. São Carlos: Fundação Pró-Memória de São Carlos - FPMSC, 2023. 140 p.

### PARTE DE MONOGRAFIA/LIVRO - NACIONAL

**ANDRICOPULO, Adriano Defini**; MENDJOUD, Bolivar Soares; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; BORGES FILHO, Raul. Saúde e bem-estar. In: **ANDRICOPULO, Adriano Defini**; BONAGAMBA, Tito José; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; BASILIO, Thamiris Cristina Costa; BARBUTO, Vanessa Soriano, (eds). *Ciência, tecnologia, inovação e o futuro de São Carlos*. São Carlos: Fundação Pró-Memória de São Carlos - FPMSC, 2023. cap. 3, p. 40-49.

### PARTE DE MONOGRAFIA/LIVRO-APRES/PREF/POSF - NACIONAL

**ANDRICOPULO, Adriano Defini**; BONAGAMBA, Tito José; TUNDISI, José Galizia. São Carlos - capital nacional do conhecimento científico e tecnológico e da inovação [Prefácio]. In: **ANDRICOPULO, Adriano Defini**; BONAGAMBA, Tito José; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; BASILIO, Thamiris Cristina Costa; BARBUTO, Vanessa Soriano; (eds.). *Ciência, tecnologia, inovação e o futuro de São Carlos*. São Carlos: Fundação Pró-Memória de São Carlos - FPMSC, 2023. p. 8-11.

### TRABALHO DE EVENTO-RESUMO - INTERNACIONAL

**ANDRICOPULO, Adriano Defini.** Computational approaches to biodiversity and neglected tropical diseases drug discovery. In: *ACS FALL MEETING, 2023, San Francisco. Current and Upcoming Schedule...* Washington, DC: American Chemical Society - ACS, 2023. oral presentation 3929654.

FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; MEDEIROS, Alex; SOUZA, Mariana Laureano de; REZENDE JUNIOR, Celso de Oliveira; CHÁVEZ, Rocío Marisol Espinoza; DIAS, Luiz; **ANDRICOPULO, Adriano Defini.** QSAR and molecular docking for a series of inhibitors of the enzyme cruzain from *Trypanosoma cruzi*. In: *ACS FALL MEETING, 2023, San Francisco. Posters...* Washington, DC:



## 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](mailto:cert@usp.br)

American Chemical Society - ACS, 2023. poster board #3956.

GARCIA, Alejandro Gomez; FRANCO, José Luis Medina; VALLI, Marília; **ANDRICOPULO, Adriano Defini**; BOLZANI, Vanderlan da Silva; ZAMORA, William; NUÑEZ, Marvin Jose; OLMEDO, Dionisio Antonio; FUMAGALLI, Miguel Angel Chavez; CCAHUANA, Haruna Barazorda. Latin American Natural Products Database (LANaPD): towards a comprehensive chemical library. In: ACS FALL MEETING, 2023, San Francisco. Posters... Washington, DC: American Chemical Society - ACS, 2023. poster board #921.

VALLI, Marília; SOUZA, Julia Medeiros; **ANDRICOPULO, Adriano Defini**. Natural products for drug discovery: cytochalasins with antitrypanosomal activity. In: ACS FALL MEETING, 2023, San Francisco. Posters... Washington, DC: American Chemical Society - ACS, 2023. poster board #3712.

YUYAMA, Kamila Tomoko; MACEDO, Claudia Castania de; MELO, Weilan Gomes da Paixão; SILVA, Matheus Henrique da; AGUIAR, Jaime Paiva Lopes; CASTELLO, Ana Carolina Devides; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; **ANDRICOPULO, Adriano Defini**; SILVA, Gilvan Ferreira da; SCHMIDT, Thomas J.; PUPO, Monica Tallarico. Discovering the potential of the alkaloids from malouetia tamaquarina (Apocynaceae) and its endophytes against Neglected Tropical Diseases (NTDs). In: ANNUAL MEETING OF THE AMERICAN SOCIETY OF PHARMACOGNOSY - ASP, 2023, Rockville. Abstracts Book... Northbrook: American Society of Pharmacognosy - ASP, 2023. p. 98, abstr. P-198B.

### TRABALHO DE EVENTO-RESUMO – NACIONAL

AFONSO, Maynara; SOUZA, Matheus da Silva; **ANDRICOPULO, Adriano Defini**. Novas quimioterapias citotóxicas para o câncer de mama metastático. In: SIMPÓSIO INTERNACIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO - SIICUSP, 31., 2023, São Carlos. Resumos... São Paulo: Universidade de São Paulo - USP, 2023. 5 p.

RAFAEL, Larissa Daniela Dias; SOUZA, Matheus da Silva; SILVA, Thiago Sabino da; **ANDRICOPULO, Adriano Defini**. Lactonas ativas em linhagem tumoral metastática de mama. In: SIMPÓSIO INTERNACIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO - SIICUSP, 31., 2023, São Carlos. Resumos... São Paulo: Universidade de São Paulo - USP, 2023. 6 p.

VALLI, Marília; TELES, Henrique Rodrigues; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; **ANDRICOPULO, Adriano Defini**. Molecular modeling studies of Leishmania infantum methionyl-tRNA synthetase. In: REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUÍMICA - RASBQ, 46., 2023, Águas de Lindóia. Anais... São Paulo: Sociedade Brasileira de Química - SBQ, 2023. res. 4DYM MED008.

YUYAMA, Kamila Tomoko; MACEDO, Claudia Castania de; MELO, Weilan Gomes da Paixão; GRUNDMANN, Carlismari Oliveira; SILVA, Matheus Henrique da; AGUIAR, Jaime Paiva Lopes; CASTELLO, Ana Carolina Devides; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; **ANDRICOPULO, Adriano Defini**; SILVA, Gilvan Ferreira da; SCHMIDT, Thomas J.; PUPO, Mônica Tallarico. Antiprotozoal potential of the alkaloids isolated from the Amazon plant Malouetia tamaquarina (Apocynaceae) and its endophytes against Neglected Tropical Diseases (NTDs). In: BRAZILIAN CONFERENCE ON NATURAL PRODUCTS - BNCP, 9., 2023, Salvador. / ANNUAL MEETING ON MICROMOLECULAR EVOLUTION, SYSTEMATICS AND ECOLOGY - RESEM, 35., 2023, Salvador. Anais eletrônicos... Campinas: Galoá, 2023. v. 9, abstr. 167319.

### Google Scholar

Total de citações = 10.004

Índice H = 53

<https://scholar.google.com/citations?user=wejDYWsAAAAJ&hl=pt-BR>

### 1.2. Orientações

#### Iniciação científica



## 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](mailto:cert@usp.br)

Gabriel Ferreira Barbosa (FAPESP – 16/01/2023 a 03/03/2023)  
Giuseppe Felice Marques da Cunha (PUB – 01/09/2023 a 31/08/2024)  
Gustavo Augusto Vieira Macedo (Sem bolsa – 13/04/2022 a 12/04/2023 e FAPESP – 01/08/2023 a 31/07/2024)  
Larissa Daniela Dias Rafael (CNPq-PIBIC – 01/09/2022 a 31/08/2023)  
Maria Eduarda Gonzalez Lopes Teixeira (Sem bolsa – 20/03/2023 a 31/08/2023 e 01/09/2023 a 31/08/2024)  
Maynara Afonso (CNPq-PIBITI – 01/09/2022 a 31/08/2023 e CNPq-PIBIC – 01/09/2023 a 31/08/2024)

### Mestrado

NADA CONSTA.

### Doutorado

Maria Eduarda Souza Dias Lino (INCT – 01/08/2022 a 12/09/2023)  
Matheus da Silva Souza (FAPESP – 01/08/2019 a 29/02/2024 e FAPESP-BEPE – 01/07/2022 a 30/06/2023)  
Thaynan Aparecida Bueno Chagas (FAPESP – 30/01/2023 a 09/02/2023)  
Thiago Henrique Döring (Sem bolsa – 17/01/2023 a 17/01/2028)

### Pós-doutorado

Analu Rocha Costa (CNPq – 01/01/2023 s 31/12/2023)  
João Victor da Silva e Silva (CAPES – 01/12/2021 a 30/09/2022 e CNPq - 01/10/2022 a 31/03/2023 e FAPESP – 01/04/2023 a 30/06/2024)  
Leonardo Luiz Gomes Ferreira (DNDi – 01/01/2020 a 31/01/2023)  
Marília Valli (FAPESP – 01/05/20219 a 30/04/2023 e CNPq – 01/05/2023 a 30/11/2024)  
Marco Aurélio Dessoy (DNDi – 01/12/2019 a 31/12/2023)  
Pricila Fernandes Pflüger (FAPESP – 01/03/2022 a 31/05/2023)  
Rafael Consolun Chelucci (DNDi – 02/05/2018 a 30/04/2023 e DNDi – 02/05/2023 a 31/12/2024)

### Técnicos de Laboratório

Simone Michelan Duarte  
Renata Krogh Andricopulo

## 2 ATIVIDADES DE ENSINO

### 2.1. Graduação e Pós-Graduação

2023/1 - Disciplina: 7600081 - Planejamento de Fármacos - Carga horária da disciplina: 60h  
2023/2 – Disciplina 7600110 – Laboratório de Física Geral II – Carga horária da disciplina: 30h  
2023/2 – Disciplina 7600087 - Métodos Avançados em Química Medicinal Carga horária da disciplina: 45h

### 2.2. Cursos extracurriculares

Cerca de 80 conferências, palestras, seminários e cursos

## 3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E SERVIÇOS À COMUNIDADE

- Presidente da Academia de Ciências do Estado de São Paulo (ACIESP) – 14/09/2023 a 14/09/2026
- Diretor Executivo da Academia de Ciências do Estado de São Paulo
- (ACIESP) – 16/09/2019 a 15/09/2023
- Membro do International Advisory Board - Centenary of the International Union of Pure 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](mailto:cert@usp.br)

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 – PROJETO DE PESQUISA

- Processo FAPEP 2018/14268-9.  
Vigência: 2019 – atual.  
Projeto Temático FAPESP-MRC/UKRI-FUNDO NEWTON. Converting natural product leads into structure- and ligand-based drug discovery campaigns against leishmaniasis and Chagas' disease. (Coordenador)
- Processo FAPEP 2021/12294-5.  
Vigência: 2021 – atual.  
Auxílio à Pesquisa – Regular. FAPESP 60 anos e o estado da arte da ciência no Estado de São Paulo em sintonia com o desenvolvimento brasileiro e mundial. (Coordenador)
- Processo no 465637/2014-0 (CNPq).  
Vigência: 2017 – atual.  
Descrição: Chamada Pública MCTI/CNPq/Capes/Fapesp no 16/2014 - Programa INCT – Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Biodiversidade e Produtos Naturais – INCTBioNat. (Coordenador Científico)
- Processo USP: 2014.1.583.76.1 (Drugs for Neglected Diseases Initiative – DNDi / USP).  
Vigência: 2016 – atual.  
Otimização para Novas Moléculas contra Trypanosoma cruzi e Leishmania spp. (Coordenador)
- Processo FAPESP nº 2013/07600-3 (FAPESP).  
Vigência: 2013 – atual.  
Centro de Pesquisa, Pesquisa e Difusão – CEPID/FAPESP. Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos – CIBFar (Coordenador de Transferência de Tecnologia)
- Processo CNPq nº 310269/2022-9 (CNPq).  
Vigência: 3/2023 – atual.  
Estratégias Integradas de Química Medicinal no Planejamento de Novos Candidatos a Fármacos. (Coordenador)

#### 6 OUTRAS PARTICULARIDADES

- Professor Titular do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo



## 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](mailto:cert@usp.br)

- Presidente da Academia de Ciências do Estado de São Paulo (ACIESP)
- Membro Titular da Academia Brasileira de Ciências (ABC)
- Bolsista de Produtividade em Pesquisa do CNPq nível 1A
- Membro Titular da Academia de Ciências do Estado de São Paulo (ACIESP)
- Fellow da International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC)
- Fellow da Royal Society of Chemistry (FRSC)
- Full Member of The Scientific Research Honor Society - Sigma Xi
- Coordenador de Transferência de Tecnologia e Membro do Comitê Executivo do Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos (CIBFar-CEPID/FAPESP)
- Diretor Executivo da Academia de Ciências do Estado de São Paulo (ACIESP)
- Coordenador Científico e Membro do Comitê de Governança do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia (INCT) em Biodiversidade e Produtos Naturais (INCT-BioNat)
- Membro Titular do Comitê Gestor do Fundo de Biotecnologia (CT-BIOTEC) do Fundo Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FNDCT) • Chefe do Departamento de Física e Ciência Interdisciplinar (FCI) – IFSC/USP
- Membro Titular da Academia de Ciências do Estado de São Paulo (ACIESP)

**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 (<http://scholar.google.com.br/citations?user=PrE1GBkAAAAJ&hl=en>)
- Total de trabalhos 385
- Livros e Capítulos 6
- Produção tecnológica
  - Patentes 4;
  - Software com registro 4;
  - Software sem registro 5;
  - Equipamentos 8
- Total de citações 2872
- Fator H 22
- Fator i10 43
- Author = (TANNUS A)
- Data: 31/12/2023

##### Web of Science ResearcherID: B-9821 2012

([https://app-webofknowledge.ez67.periodicos.capes.gov.br/author/record/784648?lang=en\\_US](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: 31/12/2023

##### 1.1.2 Trabalhos completos neste período, submetidos e em revisão.

Torres E, Wang P, Kantesaria S, Jenkins P, DeLaBarre L, Pizetta DC, Froelich T, Steyn LV, **Tannus A**, Papas KK, Sakellariou D, Garwood M.. Development of a compact NMR system to measure pO<sub>2</sub> in a tissue-engineered graft. Journal of Magnetic Resonance, 357, p.107578 (2023). (<https://doi.org/10.1016/j.jmr.2023.107578>)



## 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](mailto:cert@usp.br)

Pascoal, V. D. B., Marchesini, R. B., Athié, M. C. P., Matos, A. H. B., Conte, F. F., Pereira, T. C., Secolin, R., Gilioli, 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>)

Daniel Papoti, Diego Szczupak, Luiz GC Santos, Khalil T Chaim, Maria CG Otaduy, David J Schaeffer, Edson LG Vidoto, **Alberto Tannús**, Afonso C Silva. *Segmented solenoid RF coils for MRI of ex vivo brain samples at ultra-high field preclinical and clinical scanners*. Journal of Magnetic Resonance Open. V 16, pp 100-103 (2023). (<https://doi.org/10.1016/j.jmro.2023.100103>)

Fabiano França-Silva, Francisco Guilhien Gomes-Junior, Carlos Henrique Queiroz Rego, Agide Gimenez Marassi, **Alberto Tannús**. *Advances in imaging technologies for soybean seed analysis*. Journal of Seed Science, v.45, e202345022 (<https://doi.org/10.1590/2317-1545v45274098>).

### 1.2 Orientações

#### 1.2.1 Supervisão de pós-doutorado

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;

Maurício Falvo. *Subsistema de Prescrição Gráfica para o Console do Espectrômetro Digital do CIERMag*. Início: 02/2016. CNPq-DTI-A – Projeto Minnesota

Daniel Cosmo Pizetta. *Desenvolvimento de um framework para o Espectrometro Digital de Ressonância Magnética (DMRS)*.

#### 1.2.2 Dissertação de mestrado

Rafael Silva Montes. *Desenvolvimento de Controle de Shimming Ativo para Espectrômetro Digital*. Início em 2018 – 2023 concluída

Julia Marcolan Teixeira. *DESENVOLVIMENTO DE INSTRUMENTAÇÃO DIGITAL DE RM* – Iniciado como aluno especial em fevereiro de 2020 – em andamento como aluno regular.

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.

#### 1.2.3 Tese de doutorado

N/A.

#### 1.2.4 Iniciação científica

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

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 – 2023 - concluída

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.



## 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](mailto:cert@usp.br)

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.* Início em 2019 – 2023 concluída.

Hendrik Dumith Louzada. *Desenvolvimento de Subsistemas de Equipamento de Imagens por Ressonância Magnética.* Início em 2019 – em andamento.

Caroline Maria Rocha Santos. *Síntese de um simulador de sinais de RM utilizando conceitos de FPGA.* Início em 2020 – 2023 concluída.

## 2 ATIVIDADES DE ENSINO

### 2.1 Graduação

#### 1) 1º semestre 2023:

Demonstrativo de carga horária Docente – 2023 1º semestre

Carga Horária em Disciplinas

Disciplina: 7600039 1 Trabalho de Conclusão de Curso

Turma 2023 102 (T) Dedicção horária / período

Orientação de Trabalho de Conclusão: 60:00 Horas

Carga horária - Docente: 60:00 Horas Total de docentes: 3 Alunos matriculados: 16

Carga horária da disciplina:

Disciplina: 7600111 2 Laboratório de Física Geral III

Turma 2023103 (P) Dedicção horária / período

(\*) qui 08:10 - 11:50 (03:40 horas) 13/03/2023 a 15/07/2023 (17 semanas ministradas)

Carga horária - Docente: 31:10 Horas Total de docentes: 1 Alunos matriculados: 31

Carga horária da disciplina: aula: 30 h

Disciplina: 7600111 2 Laboratório de Física Geral III

Turma 2023104 (P) Dedicção horária / período

(\*) qui 08:10 - 11:50 (03:40 horas) 13/03/2023 a 15/07/2023 (17 semanas ministradas)

Carga horária - Docente: 31:10 Horas Total de docentes: 1 Alunos matriculados: 31

Carga horária da disciplina: aula: 30 h

Carga horária total - Docente: 122:20 horas/semestre Média semanal: 08:09 horas / semana

#### 2) 2º semestre 2023:

Demonstrativo de carga horária Docente – 2023 2º semestre

Carga Horária em Disciplinas

Disciplina: 7600110 2 Laboratório de Física Geral II

Turma 2023213 (P) Dedicção horária / período

(\*) ter 08:10 - 11:50 (03:40 horas) 07/08/2023 a 22/12/2023 (19 semanas ministradas)

Carga horária - Docente: 34:50 Horas Total de docentes: 1 Alunos matriculados: 36

Carga horária da disciplina: aula: 30 h

Disciplina: 7600134 2 Noções Básicas de Fabricação Mecânica

Turma 2023201 (P) Dedicção horária / período

sex 14:00 - 17:00 (03:00 horas) 07/08/2023 a 22/12/2023 (20 semanas ministradas)

Carga horária - Docente: 60:00 Horas Total de docentes: 1 Alunos matriculados: 8

Carga horária da disciplina: aula: 45 h

Disciplina: SEL0442 3 Projeto Final de Curso I

Turma 2023201 (T) Dedicção horária / período

sab 08:10 - 10:00 (01:50 hora) 07/08/2023 a 22/12/2023 (17 semanas ministradas)

Carga horária - Docente: 31:10 Horas Total de docentes: 18 Alunos matriculados: 31



## 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](mailto:cert@usp.br)

Carga horária da disciplina: aula: 30 h  
Carga horária total - Docente: 126:00 horas/semestre Média semanal: 08:24 horas / semana

### 2.2 Pós-graduação

Nada a declarar.

### 2.3 Cursos extra-curriculares

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\$ 10 799 120.00**

**Subprojeto: US\$ 614 465.18 + US\$ 23 655.00** para a execução do projeto em parceria (Iniciado em 2017, vigente até 2023 – prorrogado por um ano até 06/2024)

## 6 OUTRAS PARTICULARIDADES

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

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

Prof. Dr. ALESSANDRO SILVA NASCIMENTO <http://lattes.cnpq.br/8497812227637741>

## 1 ATIVIDADES DE PESQUISA

No período de 2023, foi dada continuidade aos projetos de pesquisa em desenvolvimento no âmbito do IFSC/USP: a caracterização de potenciais alvos para o desenvolvimento de novos antibióticos no contexto da biologia estrutural. Como conhecido, a resistência a antibióticos é um problema global. Os dados mais recentes indicam que, apenas no ano de 2019, infecções bacterianas foram responsáveis por 13,7 milhões de mortes (IC 95%: 10,9-17.1M)<sup>1</sup>. Os 33 patógenos bacterianos mais comuns foram responsáveis por 13,6% de todas as mortes registradas globalmente em 2019. Para fins de comparação, a pandemia da COVID-19 resultou em 6,961 milhões de mortes em três anos, i.e., entre 2020 e 2023 (Worldometer, dados de 26 de dezembro de 2023).

O problema é agravado pela crescente resistência de diversos patógenos aos antibióticos



## 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](mailto:cert@usp.br)

existentes e ao número limitado de opções farmacológicas de antibacterianos. Como observado por Walsh e Wenciewicz, os antibióticos em uso atualmente são limitados a mecanismos de ação centrados em apenas 5 vias<sup>2</sup>. Desta forma, a pesquisa e a validação de novos alvos, ação para a ação de antibióticos é algo fundamental para sociedade.

A pesquisa que está sendo desenvolvida é focada na avaliação de vias metabólicas que sejam cruciais para organismos bacterianos patogênicos e que possam ser alvejadas no desenvolvimento de novos antibióticos. Nos últimos anos, o foco de pesquisa tem sido a via de síntese das vitaminas B1 (tiamina) e B6 (piridoxina) e a síntese de açúcares que decoram a parede celular bacteriana e contribuem para a resistência a antibióticos.

No ano de 2023, foram determinadas as estruturas de duas enzimas já validadas como alvos para o desenvolvimento de antibióticos para bactérias Gram-negativas, a enzima ThiL, necessária para a fosforilação e 'ativação' da vitamina tiamina. As enzimas de *Klebsiella pneumoniae* e *Escherichia coli* tiveram suas estruturas determinadas por radiação síncrotron na fonte Sirius. No momento, está sendo padronizado testes de atividade para a triagem de potenciais inibidores. Em paralelo, determinamos também a estrutura do complexo de enzimas Pdx1-Pdx2 de *Staphylococcus aureus*. Este complexo é o responsável pela síntese da vitamina B6 neste patógeno que, sozinho, foi responsável por mais de 1 milhão de mortes globalmente em 2019. O trabalho com a caracterização estrutural e bioquímica deste complexo encontra-se submetido no momento da escrita deste relatório.

Finalmente, no escopo da via de síntese de açúcares que decoram a parede celular, foram determinadas as estruturas de duas enzimas envolvidas na síntese de ramnose, um açúcar essencial nas paredes celulares de *Enterococcus faecalis* e de *Streptococcus pneumoniae*. No caso de *E. faecalis*, uma triagem de compostos com métodos computacionais desenvolvidos no grupo permitiu a identificação de um inibidor não competitivo. Este trabalho encontra-se em fase final de preparação para submissão. Vale ressaltar que todos os patógenos citados nesta breve descrição ocupam o topo na lista dos 10 patógenos, da qual é ordenada pelo número de mortes causadas em 2019, ressaltando a relevância desta linha de pesquisa para a sociedade.

### 1.1. Produção científica

Desde o último relatório apresentado, foram publicados três trabalhos científicos:

- Chang de Azevedo, E.; Nascimento, A.S. The  $\beta$ -lactam ticarcillin is a *Staphylococcus aureus* UDP-N-acetylglucosamine 2-epimerase binder. **Biochimie**, v. 197, p. 1-8, 2022.
- Fernandes, A. F.; Leonardo, D. A.; Cavini, I.A.; Rosa, H.V.D.; Vargas, J. A.; Pereira, H. M.; Nascimento, A.S.; Garratt, R. C. Conservation and divergence of the G-interfaces of septins. **Cytoskeleton**, v. 80, p. 153-168, 2023.
- de Souza, J. V.; Nogueira, V. H. R.; Nascimento, A. S. Ligand binding free energy evaluation by Monte Carlo Recursion. **Computational Biology And Chemistry**, v. 103, p. 107830, 2023.

### 1.2. Orientações

No momento da escrita deste relatório, as seguintes orientações em andamento:

- Louis Fellipe Moreno Oliveira – Mestrado. Bolsa CAPES – IFSC/USP;
- Erick Giancarlo Suclupe Farro – Doutorado. Bolsa FAPESP – IFSC/USP.
- Raissa Ferreira Gutierrez – Doutorado. Bolsa CAPES – IFSC/USP.
- Caio de Jesus de Oliveira – Iniciação Científica. Bolsa FAPESP – IFSC/USP.
- Alex Souza Carvalho – Iniciação Científica – Bolsa PIBIC/CNPq – IFSC/USP.
- Cassio Lima dos Santos – Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) – IFSC/USP.

Além destas orientações em andamento, no ano de 2023 os seguintes orientandos concluíram



## 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](mailto:cert@usp.br)

seus trabalhos:

- Lívia Oliveira Dantas Clementino – Doutorado. Bolsa FAPESP – IFSC/USP. Data da Defesa: 19/05/2023. Tese: Enterococcus faecalis: Cluster epa.
- Angélica Luana Carrillo Barra – Doutorado. Bolsa FAPESP – IFSC/USP. Data da Defesa: 03/10/2023. Tese: Estrutura, função e dinâmica das enzimas da via de síntese de novo da vitamina B6 em Staphylococcus aureus.

## 2 ATIVIDADES DE ENSINO

No período de 2023, foram ministradas duas disciplinas de graduação no primeiro semestre, e uma disciplina obrigatória do programa de pós-graduação no segundo semestre, conforme descrito abaixo.

### 2.1. Graduação

#### **Disciplina: 7600079 - Biologia Molecular Computacional.**

É disciplina eletiva para os alunos do Bacharelado em Ciências Físicas e Biomoleculares (CFBio) e que agora passa a se chamar Bacharelado em Física Biomolecular. Vale apontar que a disciplina era oferecida regularmente pelo colega Ricardo de Marco, que nos deixou precocemente em 2020. Desde então, o professor tem oferecido esta disciplina regularmente. O curso foi reformulado, buscando trazer elementos mais modernos à disciplina, como por exemplo, tópicos de aplicações de inteligência artificial à biologia computacional. Pela avaliação feita pelos alunos, estas mudanças têm sido bem recebidas. A adesão à disciplina também sugere que é um curso que tem despertado o interesse dos discentes do IFSC.

#### **Disciplina: 7600109 - Laboratório de Física Geral I.**

Foi ofertada como disciplina obrigatória para os alunos do Bacharelado em Engenharia de Produção da EESC, e faz parte dos compromissos do IFSC com a EESC na oferta de cursos do ciclo básico para os bacharelados em engenharia.

### 2.2. Pós-graduação

No ano de 2023, foi ofertada a disciplina de **Termodinâmica de Sistemas Biológicos (SFI5854)**. Esta disciplina busca justamente integrar as áreas de biologia de macromoléculas com conhecimentos básicos da Termodinâmica e da Física Estatística. Neste oferecimento em particular (2º semestre de 2023), a turma contava com 14 alunos, o que é um número elevado para tamanho do programa, demonstrando o interesse dos discentes na área. Juntamente com o Prof. Marcos Navarro, o docente é responsável por esta disciplina no sistema Janus, com a saída recente do professor do IFSC, foi agregado o Prof. Luis Felipe como co-responsável pela disciplina e aproveitando a oportunidade para revisar os tópicos e bibliografia do curso.

### 2.3. Cursos extra-curriculares

Nada a declarar.

## 3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E SERVIÇOS À COMUNIDADE

Além das atividades de consultoria, as quais o docente aponta como serviço prestado à comunidade, tem ministrado algumas demonstrações de experimentos simples de Física em uma escola de ensino fundamental para os alunos do 3º ano E.F. Nesta etapa do ensino, os alunos têm a primeira exposição aos fenômenos óticos, como: reflexão, difração e decomposição da luz. Nesta aula demonstrativa, é mostrado a reflexão de ondas em molas, a propagação de ondas sonoras com um diapasão, além de fenômenos óticos: reflexão, refração e decomposição da luz com um prisma. As atividades se iniciaram pelo convite de uma escola próxima ao IFSC e têm por motivação demonstrar conceitos aos quais os alunos já foram expostos, mas de forma prática e lúdica.

## 4 PARTICIPAÇÃO EM COLEGIADOS E ENCARGOS ADMINISTRATIVOS



No momento da escrita deste relatório, o docente participou da gestão da instituição como:

- Membro titular do Conselho Departamental – CD/FCI;
- Membro titular da Comissão de Inclusão e Pertencimento - CIP/IFSC;
- Membro titular da Comissão Interna de Biossegurança do IFSC – CIBio/IFSC;
- Membro suplente da Congregação.

## 5 RECURSOS FINANCEIROS – PROJETO DE PESQUISA

No final de 2022, encerrou-se a vigência do projeto regular abaixo listado:  
“Investigação Estrutural da Síntese de Ramnose e Implicações na Resistência a Antibióticos”.

- PR: Nascimento, AS.
- Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP.
- Número do Processo: 2020/03983-9.
- Valor Concedido: R\$117.608,65 + US\$ 8,589.80.

Ainda em 2023, o projeto temático do qual faz parte esteve ativo e co-financiou as pesquisas:  
“Drug Discovery Contra Doenças Infecciosas Humanas”

- PI: Carsten Wrenger (ICB/USP). PP: Nascimento, AS.
- Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP.
- Número do Processo: 2015/26722-8.
- Valor Concedido: R\$1.058.727,40 + US\$ 208,592.75 e US\$211,595.53 em
- Equipamentos multiusuários.

Além destes projetos, ainda tem um processo ativo de Bolsa de Produtividade de Pesquisa (PQ – 2):

“Síntese de Ramnose Como Alvo no Desenho de Novos Antimicrobianos”;

- Processo: 302992/2021-9;
- Vigência: 01/03/2022 a 28/02/2025;

## 6 OUTRAS PARTICULARIDADES

Além das atividades aqui descritas e concernentes ao ensino de graduação e pós-graduação, pesquisa, atividades de extensão e atividades de gestão, o professor busca participar sempre que requisitado de bancas do programa de pós-graduação da instituição, bem como de outras instituições.

<sup>1</sup> IKUTA, K. S. et al. The Lancet, v. 6736, n. 22, p. 1–28, nov. 2022.

<sup>2</sup> WALSH, C. T.; WENCEWICZ, T. A. The Journal of Antibiotics, v. 67, n. 1, p. 7–22, 2014.

**Prof. Dr. ANDRE LUIZ BERTELLI AMBROSIO** <http://lattes.cnpq.br/7595933367125494>

## 1 ATIVIDADES DE PESQUISA

### 1.1. Produção científica

A linha de pesquisa é focada em ciência básica, dedicada à estudos estruturais e funcionais de enzimas e carreadores transmembranares mitocondriais, associados ao fenômeno de adaptação metabólica tumoral. Assim, majoritariamente, a produção científica se dá no formato de artigos, publicados em periódicos internacionais com política seletiva de revisão por pares. Todavia, o docente busca contribuir para problemas aplicados de saúde pública, como aqueles decorrentes da pandemia de COVID-19, através de colaborações com grupos especializados.

**Período relacionado: 01/01/2023 – 31/12/2023**

Adamoski, D., Dias, M.M., Quesñay, J.E.N., Yang, Z., Zagoriy, I., Steyer, A.M., da Silva Bastos,



## 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](mailto:cert@usp.br)

A.C., da Silva, B.N., Costa, R.K.E., Abreu, F.M.O., Islam, Z., Cassago, A., van Heel, M.G., Consonni, S.R., Mattei, S., Mahamid, J., Portugal, R.V., **Ambrosio, A.L.B.\***, and Dias, S.M.G.\* (2023) Molecular mechanism of glutaminase activation through filamentation and the role of filaments in mitophagy protection. *Nature Structural and Molecular Biology* **30**, 1902–1912. <https://doi.org/10.1038/s41594-023-01118-0>. \* **Co-autor de correspondência.**

Costa, R.K.E., Brancaglioni, G.A., Pinheiro, M.P., Adamoski, D., da Silva, B.N., Negro, C.Z., Gonçalves, K.A., Rodrigues, C.T., **Ambrosio, A.L.B.**, Guido, R.V.C., Pastre, J.C., and Dias, S.M.G. (2023) Discovery of aminothiazole derivatives as a chemical scaffold for glutaminase inhibition. *Results in Chemistry*, **5**, 100842. <https://doi.org/10.1016/j.rechem.2023.100842>.

Tavares, R.S.N., Adamoski, D., Girasole, A., Lima, E.N., Justo-Junior, A.S., Domingues, R., Silveira, A.C.C., Marques, R.E., Carvalho, M., **Ambrosio, A.L.B.**, Leme, A.F.P., AND Dias, S.M.G. (2023) Different biological effects of exposure to far-UVC (222 nm) and near-UVC (254 nm) irradiation. *Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology*, **243**, 112713. <https://doi.org/10.1016/j.jphotobiol.2023.112713>.

### 1.2. Orientações

Período relacionado: 01/01/2023 – 31/12/2023

- Doutorado: Jhon Antoni Vargas Santillan, Bolsa Institucional CAPES-ProEx. Em andamento.
- Doutorado: Leonardo Delphito, Bolsa Institucional CAPES-ProEx. Em andamento.
- Mestrado: Flávia Mayumi Odahara de Abreu, Bolsa Institucional CAPES-ProEx. Dissertação defendida em 30/10/2023.
- Mestrado: Andre Gustavo Jucovski, Bolsa Institucional CAPES-ProEx. Em andamento.
- Mestrado: Matias Nahuel Ellena, Bolsa FAPESP.MS 2021/03998-9. Dissertação defendida em 07/12/2023.
- Trabalho de Conclusão de Curso, Ciências Físicas e Biomoleculares: Luiza Prette Fiorotti. Monografia defendida em 10/07/2023.

## 2 ATIVIDADES DE ENSINO

### 2.1. Graduação

Período relacionado: 01/01/2023 – 31/12/2023

Foram ministradas diversas disciplinas obrigatórias para a graduação, incluindo uma turma no curso de Física I integrado para o campus (760005 - 5 créditos), uma de Física II (5 créditos) e uma de Laboratório de Física 2 (4 créditos), além de co-participação em quatro edições da disciplina eletiva Biologia Molecular Estrutural (4 créditos). Também, houve contribuição com a equipe que oferece as versões EAD das disciplinas integradas de Físicas 1 e 2. Maiores detalhes se encontram nos demonstrativos de carga horária docente, gerados pelo Sistema Júpiter.

### Primeiro semestre de 2023

#### Carga Horária em Disciplinas

Disciplina:	7600005 2	Física I
Turma	2023101 (T)	Dedicação horária / período
	qui 10:10 - 11:00 (00:50 hora)	13/03/2023 a 15/07/2023 (17 semanas ministradas)
	qua 10:10 - 11:50 (01:40 hora)	13/03/2023 a 15/07/2023 (18 semanas ministradas)
	seg 10:10 - 11:50 (01:40 hora)	13/03/2023 a 15/07/2023 (17 semanas ministradas)
Carga horária - Docente:	72:30 Horas	Total de docentes: 1 Alunos matriculados: 89
Carga horária da disciplina:	aula: 75 h	
Disciplina:	7600006 2	Física II
Turma	2023101 (T)	Dedicação horária / período
	qui 19:00 - 21:30 (02:30 horas)	13/03/2023 a 15/07/2023 (17 semanas ministradas)
	ter 19:00 - 21:30 (02:30 horas)	13/03/2023 a 15/07/2023 (18 semanas ministradas)
Carga horária - Docente:	87:30 Horas	Total de docentes: 8 Alunos matriculados: 71
Carga horária da disciplina:	aula: 75 h	
Carga horária total - Docente:	160:00 horas/semestre	Média semanal: 10:40 horas / semana



## Segundo Semestre de 2023

### Carga Horária em Disciplinas

<b>Disciplina:</b> 7600005 2	Física I
<b>Turma</b> 2023202 (T)	<b>Dedicação horária / período</b>
	qui 19:00 - 20:40 (01:40 hora) 07/08/2023 a 22/12/2023 (17 semanas ministradas)
	ter 19:00 - 21:30 (02:30 horas) 07/08/2023 a 22/12/2023 (19 semanas ministradas)
Carga horária - Docente: 75:50 Horas	Total de docentes: 8 Alunos matriculados: 120
<b>Carga horária da disciplina:</b> aula: 75 h	
<b>Disciplina:</b> 7600012 3	Direcionamento Acadêmico II
<b>Turma</b> 2023203 (T)	<b>Dedicação horária / período</b>
	<b>Seminários : 15:00 Horas</b>
Carga horária - Docente: 15:00 Horas	Total de docentes: 14 Alunos matriculados: 29
<b>Carga horária da disciplina:</b> aula: 30 h	
<b>Disciplina:</b> 7600080 2	Biologia Molecular Estrutural
<b>Turma</b> 2023201 (T)	<b>Dedicação horária / período</b>
	sex 08:10 - 09:50 (01:40 hora) 16/10/2023 a 22/12/2023 (10 semanas ministradas)
	qua 10:10 - 11:50 (01:40 hora) 16/10/2023 a 22/12/2023 (9 semanas ministradas)
Carga horária - Docente: 31:40 Horas	Total de docentes: 2 Alunos matriculados: 9
<b>Carga horária da disciplina:</b> aula: 60 h	
<b>Disciplina:</b> 7600110 2	Laboratório de Física Geral II
<b>Turma</b> 2023208 (P)	<b>Dedicação horária / período</b>
	(*) qui 13:30 - 17:10 (03:40 horas) 07/08/2023 a 22/12/2023 (17 semanas ministradas)
Carga horária - Docente: 31:10 Horas	Total de docentes: 1 Alunos matriculados: 34
<b>Carga horária da disciplina:</b> aula: 30 h	
<b>Carga horária total - Docente:</b> 153:40 horas/semestre <b>Média semanal:</b> 10:14 horas / semana	

## 2.2. Pós-graduação

Período relacionado: 01/01/2023 – 31/12/2023

Todo semestre ímpar, é ministrado a disciplina obrigatória (15 créditos) na pós-graduação denominada “Técnicas Físicas Aplicadas à Biologia Estrutural”. Abaixo, segue a carga horária docente, gerada pelo Sistema Janus.

Janus Sistema Administrativo da Pós-Graduação

**Carga horária docente**

Docente: 2374377 - Andre Luis Berteli Ambrosio  
Ano: 2023

---

Síglas: SFI5853 - 6 Turma: 4  
Disciplina: Técnicas Físicas Aplicadas à Biologia Estrutural

Duração: 15 semanas Período: 13/03/2023 a 25/06/2023

Horário das aulas: Segunda-feira: 13:30 às 18:30 (05:00) Carga horária semanal: 05:00 horas

Ministrantes: 1 Alunos matriculados: 21 Carga semanal por ministrante: 05:00 horas

Créditos: 15 Alunos com frequência: 21 Carga total por ministrante: 75:00 horas

---

Carga horária total na pós-graduação do Prof. Andre Luis Berteli Ambrosio em 2023: 75:00 horas

Alunos com frequência são aqueles que frequentaram pelo menos 75% das aulas.  
A carga horária da disciplina é a carga horária semanal multiplicada pelo número de semanas da disciplina.  
A carga horária por ministrante é a carga horária da disciplina dividida pelo número de ministrantes.  
A carga horária total é a soma das cargas horárias por ministrante de cada disciplina.

Gerado em 21/01/2024 14:38:25

## 2.3. Cursos extracurriculares

Período relacionado: 01/01/2023 – 31/12/2023

Nada a declarar.

## 3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E SERVIÇOS À COMUNIDADE

Período relacionado: 01/01/2023 – 31/12/2023

- Coordenador de 3 projetos PUB de ensino e 1 projeto PUB de pesquisa (01/09/2022 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](mailto:cert@usp.br)

31/08/2023).

- Coordenador de 2 projetos PUB de ensino e 1 projeto PUB de pesquisa (01/09/2023 a 31/08/2024).
- Parecerista externo FAPESP e CNPq (2010 - presente).
- Parecerista externo LNNano/CNPEM (2021 - presente).
- Revisor de artigos científicos para PNAS, Acta Crystallographica D, Oncogene, Scientific Reports, entre outros.
- Membro de Sociedades Científicas: SBBQ, SBBF e ABCr (desde 2011).

#### 4 PARTICIPAÇÃO EM COLEGIADOS E ENCARGOS ADMINISTRATIVOS

Período relacionado: 01/01/2023 – 31/12/2023

- Membro titular da Congregação, categoria Professor Associado (2021-2023);
- Membro titular da Congregação, categoria Professor Associado (2023-2025);
- Membro titular do Conselho Departamental do FCI, categoria Professor Associado (2021-2023);
- Membro titular do Conselho Departamental do FCI, categoria Professor Associado (2023-2025);
- Vice-Presidente da Comissão de Graduação do IFSC (2022-2024).
- Suplente do Coordenador, CoC Ciências Físicas e Biomoleculares (2021-2023).
- Suplente do Coordenador, CoC Ciências Físicas e Biomoleculares (2023-2025).
- Membro do Comitê de Espaço Físico do FCI (2018-presente).

#### 5 RECURSOS FINANCEIROS – PROJETO DE PESQUISA

Período relacionado: 01/01/2023 – 31/12/2023

##### Como Pesquisador Responsável

<b>Agência</b>	FAPESP
<b>Processo</b>	2019/13318-5
<b>Linha de fomento</b>	Auxílio Regular, Acordos de Cooperação FAPESP-CONICYT (Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica, Chile) – Chamada de Propostas (2019)
<b>Título</b>	Disseminando a "revolução da resolução" na América Latina, por meio de estudos em cryo-EM de uma hemocianina de molusco, com impacto biomédico substancial.
<b>Vigência</b>	01/08/2020 a 31/01/2023
<b>Pesquisador Responsável</b>	Andre Luis Berteli Ambrosio
<b>Vínculo Institucional</b>	Instituto de Física de São Carlos, 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](mailto:cert@usp.br)

#### Como Pesquisador Principal

<b>Agência</b>	FAPESP
<b>Processo</b>	2021/05726-6
<b>Linha de fomento</b>	Auxílio Temático
<b>Título</b>	Metabolismo no microambiente e o papel das trocas metabólicas na progressão tumoral
<b>Vigência</b>	01/10/2022 a 30/09/2027
<b>Pesquisador Responsável</b>	Sandra Martha Gomes Dias
<b>Vínculo Institucional</b>	Laboratório Nacional de Biociências, Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais

#### Como Pesquisador Associado

<b>Agência</b>	FAPESP
<b>Processo</b>	2022/11403-8
<b>Linha de fomento</b>	Programa de Apoio à Infraestrutura - EMU - Científico - Chamada de Propostas (2022)
<b>Título</b>	EMU Científico: Aquisição de sistemas integrados de transmissão e duplo feixe (iônico e varredura), para crio-microscopia eletrônica biológica de alta resolução por análise de partículas isoladas, tomografia in situ e difração de micro cristais.
<b>Vigência</b>	01/08/2023 a 31/07/2030
<b>Pesquisador Responsável</b>	Glaucius Oliva
<b>Vínculo Institucional</b>	Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

<b>Agência</b>	FAPESP
<b>Processo</b>	2020/06062-1
<b>Linha de fomento</b>	Auxílio Temático
<b>Título</b>	Complexos biológicos em ação, <i>in vitro</i> e <i>in silício</i> (Explorando Big-Data em crio-microscopia eletrônica)
<b>Vigência</b>	01/04/2022 a 31/03/2027
<b>Pesquisador Responsável</b>	Marin Gerard van Heel
<b>Vínculo Institucional</b>	Laboratório Nacional de Nanotecnologia, Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais



**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](mailto:cert@usp.br)

<b>Agência</b>	FAPESP
<b>Processo</b>	2017/15340-2
<b>Linha de fomento</b>	EMU - Equipamentos Multiusuários - Modalidade 3A
<b>Título</b>	Aquisição de Microscópio Eletrônico de Transmissão para Crio-microscopia Eletrônica de Partículas Isoladas - Estabelecimento de uma instalação aberta de crio-microscopia eletrônica no CNPEM
<b>Vigência</b>	01/12/2017 a 30/11/2024
<b>Pesquisador Responsável</b>	Rodrigo Villares Portugal
<b>Vínculo Institucional</b>	Laboratório Nacional de Nanotecnologia, Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais

<b>Agência</b>	FAPESP
<b>Processo</b>	2013/07600-3
<b>Linha de fomento</b>	Programas de Inovação Tecnológica / CEPID - Centros de Pesquisa, Inovação e Difusão - Chamada de Propostas (2013)
<b>Título</b>	CIBFar - Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos
<b>Vigência</b>	01/07/2013 a 30/06/2025
<b>Pesquisador Responsável</b>	Glaucius Oliva
<b>Vínculo Institucional</b>	Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

## 6 OUTRAS PARTICULARIDADES

Período relacionado: 01/01/2023 – 31/12/2023

- Presidente da banca de Defesa de Mestrado. Candidato: Matias Nahuel Ellena. Instituto de Física de São Carlos, 07/12/2023, 9 h.
- Presidente da banca de Defesa de Mestrado. Candidata: Flávia Mayumi Odahara de Abreu. Instituto de Física de São Carlos, 30/10/2023, 9 h.
- Membro titular de banca de Qualificação de Doutorado. Candidata: João Victor da Silva Guerra, Faculdade de Ciências Farmacêuticas, UNICAMP, 29/08/2023, 9 h.
- Membro titular de banca de Defesa de Doutorado. Candidata: Deborah Cezar Mendonça, Instituto de Física de São Carlos, 19/05/2023, 14 h.
- Coorganizador da Escola São Paulo de Ciência Avançada (ESPCA-FAPESP) em cryo-EM, a ser realizada em julho 2023, no IQ/USP.
- Desde setembro 2023, atuo como gestor executivo e pesquisador associado no projeto EMU Científico FAPESP 2022 (2022/11403-8), sob coordenação do Prof. Glaucius Oliva, que implementará dois microscópios eletrônicos de fronteira, dedicados à biologia estrutural por cryo-EM de alta resolução, em instalação multiusuário no IFSC área 2.
- Bolsista de Produtividade em Pesquisa CNPq, Nível 2 (Processo 307160/2021-1, vigência 1/03/2022-28/02/2025).

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

## 1 ATIVIDADES DE PESQUISA

No período referente a este relatório foram realizadas pesquisas relacionadas 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 6 artigos científicos em revistas indexadas com fator 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](mailto:cert@usp.br)

impacto médio de 6,8, sendo a revista de maior fator de impacto de 11,2 e a de menor de 2,5. Os artigos dos quais participou da publicação (considerando toda a carreira acadêmica) foram citados cerca de 400 vezes no período a que se refere esse relatório, com um percentual de autocitação de 10%. O fator H ao final do ano de 2022 foi de 34 segundo o ISI e 38 segundo o Google Scholar. O grupo sob a coordenação do docente teve destacada participação 19<sup>th</sup> NMR USERS MEETING 2023 da Associação de Usuários de Ressonância Magnética com a apresentação de 10 trabalhos (3 comunicações orais), tendo dois de seus alunos recebido os prêmios de melhor trabalho e menção honrosa entre os três melhores trabalhos apresentados. Bolsa de Produtividade em Pesquisa do CNPq nível 1B.

### 1.1. Produção científica no período

ELIAS, MEGG MADONYK COTA; SOARES, LILIANE CATONE; MAIA, LUISA CARDOSO; TAYLOR, JASON GUY; ADARME, OSCAR FERNANDO HERRERA; FERREIRA, GABRIEL MAX DIAS; **DE AZEVEDO, EDUARDO RIBEIRO**; DE SIERVO, ABNER; DA SILVA, LUIS HENRIQUE MENDES; GURGEL, LEANDRO VINÍCIUS ALVES Batch and continuous adsorption of Cd(II) and Pb(II) on polycarboxylated sugarcane bagasse. JOURNAL OF WATER PROCESS ENGINEERING. , v.54, p.103947 , 2023.

KANE, AISSATA OUSMANE; CORTEZ, ANELYSE ABREU; PELLEGRINI, VANESSA OLIVEIRA ARNOLDI; NGOM, BALLA DIOP; FILGUEIRAS, JEFFERSON G.; **DE AZEVEDO, EDUARDO R.**; POLIKARPOV, IGOR. Combined liquid hot water and sulfonation pretreatment of sugarcane bagasse to maximize fermentable sugars production. INDUSTRIAL CROPS AND PRODUCTS. , v.201, p.116849 - , 2023.

HENRIQ E NOVOTNY, ETELVINO; **RIBEIRO DE AZEVEDO, EDUARDO**; DE GODOY, GUSTAVO; MARTELOZO CONSALTER, DANIEL; COOPER, MIGUEL. Determination of soil pore size distribution and water retention curve by internal magnetic field modulation at low field 1H NMR. GEODERMA. , v.431, p.116363 , 2023.

CAPETTI, CAIO CESAR DE MELLO; PELLEGRINI, VANESSA OLIVEIRA ARNOLDI; ESPIRITO SANTO, MELISSA CRISTINA; CORTEZ, ANELYSE ABREU; FALVO, MAURÍCIO; CURVELO, ANTONIO APRIGIO DA SILVA; CAMPOS, ELEONORA; FILGUEIRAS, JEFFERSON GONÇALVES; GUIMARAES, FRANCISCO EDUARDO GONTIJO; **DE AZEVEDO, EDUARDO RIBEIRO**; POLIKARPOV, IGOR. Enzymatic production of xylooligosaccharides from corn cobs: Assessment of two different pretreatment strategies. CARBOHYDRATE POLYMERS., v.299, p.120174 , 2023.

NOVOTNY, ETELVINO H.; GARCIA, RODRIGO H.S.; **DE AZEVEDO, 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. , v.14-15, p.100089 , 2023.

CARDOSO MAIA, LUISA; CATONE SOARES, LILIANE; MADONYK COTA ELIAS CARVALHO, MEGG; ROCHA DOS SANTOS, GRAZIELLE; **RIBEIRO DE AZEVEDO, EDUARDO**; DOS SANTOS SOARES, JAQUELINE; VINÍCIUS ALVES GURGEL, LEANDRO. Synthesis and application of an unprecedented bioadsorbent for removing arsenic from aqueous systems. SEPARATION AND PURIFICATION TECHNOLOGY. v.324, p.124495 , 2023.

### 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).



## 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](mailto:cert@usp.br)

### **Mestrado:**

Bruno Trebbi. (Financiamento: CAPES)

### **Iniciação Científica:**

Marina Perassolli de Lazari (Financiamento: Termo de Cooperação CENPES/PETROBRAS)

João Gabriel da Silva Soares (Financiamento: Dow Chemical)

Stefano Calabrez Mendes (Financiamento: PUB – USP)

João Eduardo de Oliveira (Termo de Cooperação CENPES/PETROBRAS)

Victor Hugo Videira Miranda (Financiamento: PUB – USP)

### **Orientação de trabalho de conclusão e curso:**

Stefano Calabrez Mendes - RMN de 1H no domínio do tempo para estudos de difusão molecular de líquidos confinados em sistemas porosos não consolidados – Trabalho de Conclusão de Curso apresentado no Instituto de Física de São Carlos em dezembro de 2023. Nota 9,0.

João Eduardo de Oliveira - Estudo da RMN de 1H Duplo Quantum no domínio do tempo e aplicações na avaliação de inter cruzamento de cadeias poliméricas – Trabalho de Conclusão de Curso apresentado no Instituto de Física de São Carlos em dezembro de 2023. Nota 9,5.

### **Trabalhos premiados**

Development and Characterization of Nanoporous Materials Using Cryoporometry and Nuclear Magnetic Resonance Techniques, B Trebbi, RHS Garcia, ER de Azevedo, J Filgueiras, 19<sup>th</sup> NMR USERS MEETING 2023 da Associação de Usuários de Ressonância Magnética, Prêmio de melhor trabalho no evento.

Combination of 1H time domain NMR, 13C solid-state NMR and infrared spectroscopies as a tool for elucidating degradation mechanisms in constructing polymers. Marina Perassolli de Lázari, João Eduardo de Oliveira, Rodrigo Henrique Santos GARCIA, Sylvia TEIXEIRA, Erica CHAVES, Aline LIMA, Hercílio HONORATO, Sonia Maria Cabral De MENEZES, Luiz Antônio de Oliveira Nunes, Antonio Silva, Eduardo Ribeiro de Azevêdo, , 19<sup>th</sup> NMR USERS MEETING 2023 da Associação de Usuários de Ressonância Magnética, Menção honrosa de melhor entre os três trabalhos do evento.

## **2 ATIVIDADES DE ENSINO**

### **2.1. Graduação**

- Disciplina: 7600005 2 Física I - Turma 2022208.Carga horária docente: aula: 72:30 h.
- Disciplina: 7600006 2 Física II - Turma 2022201.Carga horária docente: aula: 10:45 h.
- Disciplina: 7600039 1 Orientação de Trabalho de Conclusão de Curso – Turma 2023101.Carga horária docente: aula: 60 h.
- Disciplina: 7600005 2 Física I - Turma 2022202.Carga horária docente: aula: 09:30 h.
- Disciplina: 7600006 2 Física II - Turma 2022209.Carga horária docente: aula: 79:1 h.

### **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 da Comissão de inclusão e pertencimento 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 – PROJETO DE PESQUISA

- Grant da Bolsa de Produtividade em Pesquisa do CNPQ (Nível 1B). Valor: R\$ 67.200,00. Vigência: 01/03/2023 a 28/02/2027
- Termo de cooperação IFSC/CENPES/PETROBRAS. Valor: R\$ 699.818,48. Vigência: 31/12/2020 a 29/12/2023.
- Aditivo ao Termo de cooperação IFSC/CENPES/PETROBRAS. Valor: R\$ R\$ 348.977,45. Vigência: 31/12/2022 a 29/12/2024.

#### 6 OUTRAS PARTICULARIDADES

- Participação de banca de contratação de docente no IFSC.
- Participação como avaliador de estágio probatório CERT
- Participação como avaliador em seção da Semana da Física do IFSC/USP.
- Participação como palestrante convidado em workshop sobre RMN no estado sólido no IFSC/USP.

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

#### 1 ATIVIDADES DE PESQUISA

As atividades de pesquisa em 2023, focaram na pesquisa do estado vítreo, um material com grande relevância para a sociedade. Vidros e vitro-cerâmicas são materiais com propriedades 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 atômica e nanométrica. Assuntos importantes neste contexto são as interações entre diferentes geradores de rede (network former mixing effects), a otimização do ambiente de íons luminescentes em vidros fotônicos, e os mecanismos de cristalização gerando vitro-cerâmicas com alta condutividade elétrica.

Em 2022 foram publicados 10 artigos em revistas com política editorial seletiva (geralmente revistas Q1) e uma resenha convidada/ invited review, todos gerando 1178 citações em 2023 e 38 em 2024. (Scopus, 08/01/2024). No total, os indicadores quantitativos (Scopus) são: N = 587, H = 63, citações totais 18480 (08 de janeiro, 2024).

##### 1.1. Produção científica

###### 1.1.1. Artigos publicados em revistas com política editorial seletiva:

597. Highly porous niobium-containing glasses as catalysts for microwave-assisted rapid conversion of sugars into HMF, M. J. F. Costa, Al. A. S. Gonçalves, R. Rinaldi, H. Bradtmüller, **H. Eckert**, E. B. Ferreira, Catalysis Commun. 174, 106577 (2023).

598. Solid state NMR of the rare earth nuclei: Applications in solid-state inorganic chemistry **H. Eckert**, Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering.



## 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](mailto:cert@usp.br)

Comprehensive Inorganic Chemistry III, 1-10, pp. 178-208 (2023).

599. Preparation, characterization, and structural studies of new sodium gallium tungstate phosphate glasses, T. A. Lodi, G. Galleani, M. de Oliveira Junior, S. H. Santagneli, **H. Eckert**, A.S.S. de Camargo, J. Non-Cryst-Solids 603, 122100 (2023).

600. Structural characterization of a new fluorophosphotellurite glass system, R.G. Capelo, J. M. Gerdes, U. Rehfuß, L.D. Silva, M.R. Hansen, L. van Wüllen, **H. Eckert**, D. Manzani, Dalton Trans. 52, 2227-2242 (2023).

601 Network Modifier Effects in Multiple Network Former Glasses: NMR Results on the System  $70 \text{SiO}_2 - 7.5 \text{P}_2\text{O}_5 - (22.5 - x)\text{Al}_2\text{O}_3 - x\text{Na}_2\text{O}$  ( $0 \leq x \leq 17.5$ ), M. Logrado, R. E. Youngman, B. G. Aitken, **H. Eckert**, J. Phys. Chem. C 127, 17269–17284 (2023).

602. Structural organization of phase-separated bioactive glasses and the clustering of Si, P, B, Na and F atoms investigated by solid-state NMR and Monte Carlo simulations, A. Gaddam, G. Tricot, P. Gołębiewski, H.R. Fernandes, R. Buczyński, J.M.F. Ferreira, **H. Eckert**, Acta Materialia 259 119203 (2023).

603. Niobium incorporation into rare-earth doped aluminophosphate glasses: Structural characterization, optical properties, and luminescence, J. H. Faleiro, N.O. Dantas, A. C.A. Silva, H.P. Barbosa, B.H.S.T. da Silva, K. de O. Lima, G. de Freitas Silva, R. R. Gonçalves, R. Falci, Y. Messadeq, I. Diaz de Oliveira Branco, B. M. Cerrutti, H. Bradtmüller, **H. Eckert**, J. L. Ferrari, J. Non-Cryst. Solids. 605, 122173 (2023).

604. Densification of Sodium Borosilicate Glasses at Ambient Temperature: Structural Investigations by Solid-State Nuclear Magnetic Resonance and Raman Scattering, M. Logrado, T. Inoue, S.Nakane, Y. Kato, H. Yamazaki, A. Yamada, **H. Eckert**, J. Phys. Chem. Lett. 14, 4471-4481 (2023).

605. Extending the Palette of Luminescent Primary Thermometers: Yb<sup>3+</sup>/Pr<sup>3+</sup> Co-Doped Fluoride Phosphate Glasses, F. E. Maturi, A. Gaddam, C. D. S. Brites, J. M. M. Souza, **H. Eckert**, S. J. L. Ribeiro, L. D. Carlos, D. Manzani, Chem. Mater. 2023, in press.

606. Structure of amorphous materials in the NASICON system  $\text{Na}_{1+x}\text{Ti}_2\text{SixP}_3-x\text{O}_{12}$  R. Mendes Da Silva, A. Zeidler, H. Bradtmüller, **H. Eckert**, H. E. Fischer, C. J. Benmore, P. S. Salmon, J. Phys. Cond. Matter 35(27),274002 (2023).

607 Structural impact of niobium oxide on lithium silicate glasses: Results from advanced interaction-selective solid-state nuclear magnetic resonance and Raman spectroscopy, H. Bradtmüller, Q. Zheng, A. Gaddam, **H. Eckert**, E.D. Zanotto, Acta Materialia 255,119061 (2023).

### 1.2. Orientações

Em 2023, foram obtidas três titulações de alunos/ alunas sob orientação do docente no IFSC. Foram duas alunas de Iniciação Científica (projetos PUB e FAPESP), uma aluna pelo TCC, um aluno de Mestrado do IFSC (sem bolsa) e dois alunos de doutorado no IFSC (financiados pela FAPESP e pelo convênio com Nippon Electric Glass). Além disso, participou como supervisor de dois pós-docs (FAPESP), o termo de um deles se concluiu em 2023. Também como co-supervisor de um pós-doc FAPESP da UFSCar. Pela associação com a Universidade de Münster - Alemanha, foi co-orientador de um aluno de doutorado, que foi pago pelos recursos de DFG na Universidade de Münster, o doutorando defendeu a tese em outubro de 2023 e recebeu o título de Dr. rer. nat.



## 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](mailto:cert@usp.br)

Nome	Anos	Programa (recurso)
Isabela Branco (IFSC)	2021-2023	IC (PUB)
Yara Gomes (IFSC)*	2021-2023	IC (FAPESP), TCC
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)
Maximilian Gerdes (WWU Münster)*	2019-2023	Doutorado Química (DFG)
Dr. Anuraag Gaddam (IFSC)*	2021-2023	pós-doc (FAPESP)
<u>Dr. Henrik Bradtmüller (WWU Münster)</u>	2020-2023	pós-doc (UFSCar)

\*concluído durante 2023

Além disso, foi hospedeiro de três estagiários, alunos de pós-graduação de universidades estrangeiras, que vieram para estágios de pesquisa como pesquisador visitante, durante 3 meses:

- Walter Linke, aluno de mestrado, WWU Münster, Alemanha
- Wiebke Zielasko, aluna de mestrado, WWU Münster, Alemanha
- Mojtaba Abbasi, aluno de doutorado, Universidade de Manitoba, Canadá

## 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. Além disso, foi orientador de um projeto TCC (Yara Gomes), relacionado à pesquisa de caracterização de vidros pela RMN. No segundo semestre de 2024, foi ministrado a disciplina de Graduação 7600117 “Física Aplicada para Químicos”.

### 2.2. Pós-graduação

Ministrou a disciplina SFI-5711 para 9 e 6 alunos do IFSC, respectivamente, durante o primeiro e o segundo semestre de 2023. No segundo semestre participaram dois intercambistas de WWU Münster - Alemanha.

### 2.3. Cursos extracurriculares

No ambiente internacional, regularmente é ministrado minicursos de Ressonância Magnética Nuclear, e de vários assuntos da Espectroscopia Física. Pelo convênio dentro do ambiente ERASMUS-MUNDUS, IFSC é uma instituição associada ao Programa Mestrado Europeu Master in Materials Science Exploring Large Scale Facilities (MaMaSELF), em que participou como docente visitante, na Universidade Montpellier. Deu um minicurso on-line, Solid State NMR, em janeiro 2023, 12 horas.

Além disso, foram apresentadas três palestras convidadas no Workshop on Advanced Solid State NMR (WASS-NMR), São Carlos-SP, Brazil, 5-8 June 2023.

ECKERT, H., Fundamentals of NMR Spectroscopy. A Historical Perspective,  
ECKERT, H., Dipolar NMR Strategies for the Structural Characterization of Glasses,  
ECKERT, H., NMR of Quadrupolar Nuclei.

## 3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E SERVIÇOS À COMUNIDADE

Foram apresentadas as seguintes palestras convidadas em universidades, congressos e workshops nacionais e internacionais:

- ECKERT, H. Publish and Perish in the Age of Bibliometrics, RWTH Aachen, January de 2023.
- ECKERT, H. Solid state NMR techniques for the structural elucidation of dental glass ceramics, IFSC/FAU workshop, fevereiro de 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](mailto:cert@usp.br)

- ECKERT, H. Homo- and heteronuclear dipolar recoupling NMR techniques: adaptations and applications to glasses, workshop on Solid State NMR of glasses, Corning, julho de 2023.
- ECKERT, H. High pressure experiments and network former mixing effects in borosilicate glasses, Borate- Phosphate conference, Corning, US, julho de 2023.
- ECKERT, H. Network structure and local environments in fluoride phosphate and niobium phosphate glasses: New dipolar NMR strategies, Borate- Phosphate conference Corning US, julho de 2023.
- ECKERT, H. Network structure and local environments in fluoride phosphate glasses, AUREMN meeting, Rio de Janeiro, outubro de 2023.
- ECKERT, H. Solid state EPR techniques for the structural elucidation of dental glass ceramics, IFSC/FAU workshop, dezembro de 2023.

Organizou as seguintes missões internacionais:

- H. ECKERT, FAPESP, 2022/01286-4 (BAYLAT/StMBW) Materiais vítreos e vitro-cerâmicos R\$ 221.175,00. Realizado 2 workshops no IFSC (fevereiro 2023), e FAU Erlangen-Nürnberg (dezembro 2023), com 30 participantes em cada uma.
- H. ECKERT, FAPESP, 2022/14232-0. Projeto Sprint, IFSC-Bath University, UK R\$ 4000 + US \$10.040,00. Missão científica, ILL, França, junho 2023.
- H. ECKERT, FAPESP 2022/07637-3, APR-M-ERA.NET R\$ 74.788,48 + US\$ 36.270,40, com Fraunhofer - Gesellschaft, Alemanha.

Além disso, continuou como membro das comissões de planejamento dos seguintes congressos: International Symposium on Non-Oxide Glasses (ISNOG), e Borate/Phosphate Conference.

#### **4 PARTICIPAÇÃO EM COLEGIADOS E ENCARGOS ADMINISTRATIVOS**

É membro titular do Conselho de FCI e da Congregação do IFSC. Serviu como membro de uma comissão 'ad hoc' encarregado com o planejamento departamental para novas vagas no IFSC. Participa regularmente em bancas de doutorado no IFSC e na WWU Münster. Desde 2018, serve como Membro da Coordenação da Área Física, FAPESP, São Paulo.

#### **5 RECURSOS FINANCEIROS – PROJETO DE PESQUISA**

FAPESP 2013-07793-6: CEPID, Pesquisador Principal e Vice Coordenador, Center of Research, Technology and Education in Vitreous Materials (CeRTEV); 2019-2025.

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. O projeto encerrou em 2023.

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

Nippon Glass: convênio 1013109: Structural Characterization of Crack-resistant Glasses, 2022-2024.

FAPESP 2022/07637-3 M-ERA.NET: proteção de superfície e otimização interfacial por revestimentos de deposição de camada atômica (DCA em eletrólitos sólidos a base de sulfeto, projeto de pesquisa, 2023-2025.

DFG 413550885, New Optical Materials based on Rare Earth Doped Oxyfluoride Glasses and Ceramics: Structural Studies by Magnetic Resonance Methods: projeto de pesquisa e bolsa de doutorado, 2019 – 2024.

FAPESP 2022/01937-5 Incorporação do nióbio em vidros fotônicos: Novas Relações



## 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](mailto:cert@usp.br)

estruturais/funções descobertas por técnicas avançadas de ressonância magnética, bolsa de doutorado, 2022-2025.

FAPESP 2021/14705-2 Escrita direta a laser em vidros fluorofosfatos codopados com terras raras e prata para produção de dispositivos ópticos não lineares, bolsa de doutorado 2023-2025.

FAPESP 2021/01170-3 Nanossistemas luminescentes multifuncionais vítreos e cerâmicos para aplicações em termometria e oximetria, bolsa de doutorado 2021-2024.

FAPESP 2019/21770-5: Materiais luminescentes incorporados à vidros: Novos compósitos para aplicações em iluminação de segurança e detectores de radiação, bolsa de PD 2019-2024.

FAPESP 2019/12588-9 Biossensores ópticos para detecção rápida de bactérias patogênicas, bolsa de doutorado 2019-2024.

FAPESP 2021/08871-7 Incorporação do Gálio em Vidros Bioativos: Novas Relações estruturais/funções descobertas por técnicas de RMN de estado sólido, bolsa de IC, 2022-2023. O projeto encerrou em 2023.

FAPESP 2021/06370-0 Correlações entre Composições, Estrutura e Propriedades em Biovidros contendo Boro, elucidado por Ressonância Magnética Nuclear do Estado Sólido, bolsa de PD, 2021-2023. O projeto encerrou em 2023.

FAPESP 2022/14232-0: SPRINT, Titânio e Nióbio: dois elementos importantes, mas enigmáticos na ciência de vidros, projeto de mobilidade, 2023-2024.

FAPESP 2022/01286-4: BAYLAT/StMBW Materiais vidros e vitrocerâmicos em odontologia, projeto de mobilidade, 2023-2024.

### 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 587 publicações com 18480 citações (data 08/01/2022); número médio de citações por publicação = 31.5; índice H = 63.

Com base nas informações acima, o professor acredita estar desempenhando adequadamente 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 2023, as atividades de pesquisa em doenças infecciosas foram continuadas. A pesquisa que o docente conduz 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 2023, foram publicados 9 trabalhos em revistas indexadas internacionais:

1. \*Moreira, Natália M.; De Miranda, Ingrid T.; Dos Santos, Jhonathan R. N.; Opatz, Till; Oliva, Glaucius; **Guido, Rafael V. C.**; Corrêa, Arlene G. Copper-Catalyzed Synthesis of Pyrrolo[1,2-]quinazolines and Pyrrolo[2,1-]isoquinolines and Antiplasmodial Evaluation.



## 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](mailto:cert@usp.br)

JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, v.88, p.1, 2023.  
<https://doi.org/10.1021/acs.joc.3c00616>

2. Costa, Renna K.E.; Brancaglioni, Guilherme A.; Pinheiro, Matheus P.; Meira, Douglas A.; Da Silva, Bianca N.; De V. Negro, Cyro Z.; De A. Gonçalves, Kaliandra; Rodrigues, Camila T.; Ambrósio, André L.B.; **Guido, Rafael V.C.**; Pastre, Julio C.; Dias, Sandra M.G. Discovery of aminothiazole derivatives as a chemical scaffold for glutaminase inhibition. RESULTS IN CHEMISTRY, v.5, p.100842, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.rechem.2023.100842>
3. \*Gomes, Paula; **Guido, Rafael V. C.** Editorial: Antimalarial chemotherapy in the XXIst century, volume II. FRONTIERS IN PHARMACOLOGY, v.14, p.1, 2023. <https://dx.doi.org/10.3389/fphar.2023.1229764>
4. Bitencourt, Natália Vitória; Righetto, Gabriela Marinho; Camargo, Ilana Lopes Baratella Cunha; De Godoy, Mariana Ortiz; **Guido, Rafael V. C.**; Oliva, Glaucius; Santos-Filho, Norival Alves; Cilli, Eduardo Maffud. Effects of Dimerization, Dendrimerization, and Chirality in p-BthTX-I Peptide Analogs on the Antibacterial Activity and Enzymatic Inhibition of the SARS-CoV-2 PLpro Protein. PHARMACEUTICS, v.15, p.436, 2023. <https://dx.doi.org/10.3390/pharmaceutics15020436>
5. \*Maciel, Larissa G.; Ferraz, Matheus V. F.; Oliveira, Andrew A.; Lins, Roberto D.; Dos Anjos, Janaína V.; **Guido, Rafael V. C.**; Soares, Thereza A. Inhibition of 3-Hydroxykynurenine Transaminase from Aedes aegypti and Anopheles gambiae: A Mosquito-Specific Target to Combat the Transmission of Arboviruses. ACS BIO & MED CHEM AU, v.3, p.1, 2023. <https://dx.doi.org/10.1021/acsbiomedchemau.2c00080>
6. Andrade, Alice O.; Santos, Najara Akira C.; Bastos, Alessandra S.; Pontual, José Daniel C.; Araújo, Cristiane S.; Lima, Analice S.; Martinez, Leandro N.; Ferreira, Amália S.; Aguiar, Anna Caroline C.; Teles, Carolina B. G.; **Guido, Rafael V. C.**; Santana, Rosa A.; Lopes, Stefanie C. P.; Medeiros, Jansen F.; Rizopoulos, Zaira; Vinetz, Joseph M.; Campo, Brice; Lacerda, Marcus Vinicius G.; Araújo, Maisa S. Optimization of Plasmodium vivax infection of colonized Amazonian Anopheles darlingi. SCIENTIFIC REPORTS, v.13, p.18207, 2023. <https://dx.doi.org/10.1038/s41598-023-44556-y>
7. \*De Amorim, Marcelo R.; Barbosa, Camila De S.; Paz, Tiago A.; Ióca, Laura P.; Nicácio, Karen J.; De Oliveira, Lucianne F. P.; Goulart, Mirian O.; Paulino, Julia M.; Da Cruz, Mateus O.; Ferreira, Antonio G.; Furlan, Maysa; De Lira, Simone P.; Dos Santos, Raquel A.; Rodrigues, André; **Guido, Rafael V. C.**; Berlinck, Roberto G. S. Polyketide- and Terpenoid-Derived Metabolites Produced by a Marine-Derived Fungus, Peroneutypa sp.. JOURNAL OF NATURAL PRODUCTS, v.86, p.1, 2023. <https://dx.doi.org/10.1021/acs.jnatprod.3c00175>
8. Noske, Gabriela Dias; De Souza Silva, Ellen; De Godoy, Mariana Ortiz; Dolci, Isabela; Fernandes, Rafaela Sachetto; **Guido, Rafael V. C.**; Sjö, Peter; Oliva, Glaucius; Godoy, Andre Schutzer Structural basis of nirmatrelvir and ensitrelvir activity against naturally occurring polymorphisms of the SARS-CoV-2 Main Protease. JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY, v.299, p.103004, 2023. <https://dx.doi.org/10.1016/j.jbc.2023.103004>
9. Mendes, Léia Da C.; Dantas, Thais B. Vieira; Severino, Richele P.; Da Silva, Larissa Ramos G.; De Souza, Dulce H. F.; [Cass, Quezia B.](#); Ramalho, Suelem D.; Vieira, Paulo C.; De Souza, Guilherme E.; **Guido, Rafael V. C.**; Urschel, Marie-Kathrin; Kersten, Christian; De Sousa, Lorena R. F. Using molecular networking and docking to explore arginase inhibitors among Drimys brasiliensis chemical constituents. MEDICINAL CHEMISTRY RESEARCH, v.32, p.1, 2023. <https://dx.doi.org/10.1007/s00044-023-03123-w>



## 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](mailto:cert@usp.br)

\*artigos nos quais é autor correspondente

As estatísticas da produção científica até janeiro/2024 estão apresentadas na Tabela 3.

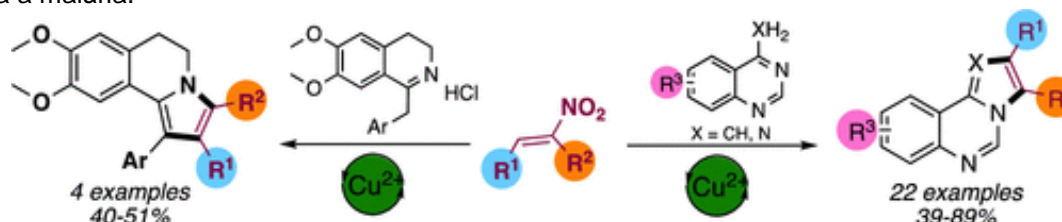
**Tabela 3.** Estatísticas da produção científica até janeiro/2024.

Base de Dados	Trabalhos Publicados*	Citações	Fator H
ISI – Web of Science	105	1732	24
Scopus	100	1960	26
Google Scholar	368	2944	30

\*Número total de trabalhos publicados em periódicos com seletiva política editorial = 104

Entre os artigos publicados em 2023, importante destacar o artigo publicado no periódico Journal of Organic Chemistry (doi: [10.1021/acs.joc.3c00616](https://doi.org/10.1021/acs.joc.3c00616)). Brevemente, reações envolvendo ligações C (sp<sup>3</sup>)–H de azaarenos têm sido amplamente estudadas nos últimos anos, pois permitem a funcionalização direta desses N-heterociclos sem o uso de condições de reação adversas. Neste trabalho, descrevemos a funcionalização C (sp<sup>3</sup>)–H de 4-metilquinazolininas e 1-benzilisoquinolininas, empregando β-nitroestirenos α-substituídos catalisados por acetato de cobre barato. Sob a condição otimizada, 21 pirrolo[1,2-c]quinazolininas, bem como uma imidazo[1,2-c]quinazolina e 4 pirrolo[2,1-a]isoquinolininas, foram obtidas com rendimentos moderados a bons. Além disso, a atividade biológica das pirrolo[1,2-c]quinazolininas foi avaliada contra Plasmodium falciparum. Em geral, os substituintes na porção quinazolina, por exemplo, Br, F, OCH<sub>3</sub> e CH<sub>3</sub>, na posição 6 da quinazolina não afetaram os valores de IC<sub>50</sub> em comparação com o análogo não substituído 3a. Por outro lado, a substituição de um grupo metila no anel pirrol por etil (3m) resultou em perda de atividade. Em relação aos substituintes na posição para da porção nitroestireno, apenas o p-F substituído (3d) apresentou atividade antiplasmodial inferior a 15 μM. A substituição por outros nitroestirenos halogenados, como p-Br (3c) e p-Cl (3b), resultou em diminuição da atividade inibitória (IC<sub>50</sub> > 30 μM). A presença de grupos retiradores de elétrons ou volumosos, como CF<sub>3</sub>, CN e Ph (3e, 3f e 3g, respectivamente), bem como um p-OCH<sub>3</sub> (3j) na porção nitroestireno mostrou perfil de inibição reduzido. Por outro lado, um substituinte CH<sub>3</sub> na posição orto (3i) mostrou uma ligeira melhora na atividade antiplasmodial, enquanto um grupo m-OCH<sub>3</sub> (3k) determinou um aumento de duas vezes na atividade inibitória relacionada ao análogo não substituído 3a. Além disso, a mudança do anel pirrol para imidazol (3x) diminuiu drasticamente a atividade inibitória.

A atividade citotóxica dos compostos mais potentes 3i, 3k e 3q foi avaliada contra a linha celular de fígado humano HepG2. Os valores de IC<sub>50</sub> variaram de 79 a >400 μM. Esses resultados indicaram que os novos derivados da pirroloquinazolina apresentam atividade antiplasmodial promissora, com baixo efeito citotóxico nas células do fígado e valores moderados de índice de seletividade (SI = 9 – >30). Portanto, o estudo da relação estrutura-atividade auxiliará o planejamento de novos derivados mais potentes e seletivos como 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 pirrolo[2,1-a]isoquinolininas publicado no periódico Journal of Organic Chemistry, 2023, 88, 13, 8781–8790 (doi: [10.3390/ph15070814](https://doi.org/10.3390/ph15070814)).



## 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](mailto:cert@usp.br)

### 1.2. Orientações

É orientador pleno (nível doutorado) do Programa de Pós-Graduação em Física do IFSC-USP (nível 7 da CAPES). Em 2023, supervisionou 6 pós-docs, 6 alunos doutorados, 1 aluna de mestrado e 2 alunos de iniciação científica, todos com bolsas de agências de fomento (Tabela 4). A formação de recursos humanos inclui a finalização de duas teses de doutorado (Camila de Souza Barbosa e Victor H. R. Nogueira, agendadas para ocorrer em 30.01 e 01.02, respectivamente) e quatro projetos de pós-doutorado (Tabela 4). Nesse contexto, é importante mencionar que os pós-doutorandos egressos do grupo de pesquisa têm conseguido se colocar no mercado de trabalho, assumindo posições no Brasil e no exterior, por exemplo:

- Dra. Anna Caroline C. Aguiar – aprovada em concurso público como docente na Universidade Federal de São Paulo – UNIFESP, São Paulo)
- Dra. Natália Menezes Moreira Borges – contratada como pesquisadora sênior na indústria farmacêutica nacional Cristália, São Paulo
- Dr. Alexandre Victor Fassio – contratado como pesquisador sênior na indústria farmacêutica americana Metaphore Biotechnologies, EUA
- Dr. Guilherme E. de Souza – contratado como pós-doc na Griffith University, Austrália

**Tabela 4.** Lista de alunos de graduação/pós-graduação/pós-doc orientados em andamento/concluídos em 2023.

Aluno	Nível	Instituição	Curso	Orientador/ Coorientador	Financiamento	Situação
Sarah El Chamy Maluf	Pós-Doc	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	FAPESP	Em andamento
Vinícius Bonatto	Pós-Doc	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	FAPESP	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	Doutorado	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	FAPESP	Em andamento
Camila Fonseca Silva Rigo	Mestrado	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	CAPES	Em andamento
João Pedro Salazar Martins	Iniciação Científica	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	FAPESP	Em andamento
João Victor Martins Zordan Andrade	Iniciação Científica	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	CNPq	Em andamento
Natália Menezes Moreira Borges	Pós-Doc	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	FAPESP	Concluído
Guilherme E. de Souza	Pós-Doc	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	FAPESP	Concluído
Alexandre Victor Fassio	Pós-Doc	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	FAPESP	Concluído
Anna Caroline C. Aguiar	Pós-Doc	IFSC-USP	Física Biomolecular	Orientador	MMV	Concluído

## 2 ATIVIDADES DE ENSINO

### 2.1. Graduação

Em 2023, foram ministradas 6 disciplinas teóricas e práticas oferecidas pelo IFSC-USP para os cursos de graduação: i) Bacharelado em Ciências Físicas e Biomoleculares; ii) Engenharia Civil; e, iii) Ciências da Computação (Tabela 5).



## 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](mailto:cert@usp.br)

**Tabela 5.** Disciplinas oferecidas junto ao IFSC no período 2023.

Ano/Semestre	Sigla	Disciplina	Duração	Carga horária	Alunos
2023/1º	7600109	Laboratório de Física Geral I (Ciências da Computação – turma 1)	18 semanas	33 horas (2 créditos)	29
2023/1º	7600109	Laboratório de Física Geral I (Ciências da Computação – turma 2)	18 semanas	33 horas (2 créditos)	30
2023/1º	7600140	Fundamentos de Biologia Celular (Ciências Físicas e Biomoleculares)	18 semanas	51 horas (4 créditos)	44
2023/1º	<b>Carga horária total - Docente: 117:00 horas/semestre</b> <b>Média semanal: 07:48 horas / semana</b>				
2023/2º	7600110	Laboratório de Física Geral II (Engenharia Civil – turma 1)	20 semanas	36:40 horas (2 créditos)	30
2023/2º	7600080	Biologia Molecular Estrutural (Ciências Físicas e Biomoleculares)	10 semanas	33:20 horas (2 créditos)	9
2023/2º	7600096	Modelagem e Eng. de Proteínas (Ciências Físicas e Biomoleculares)	19 semanas	38 horas (2 créditos)	10
2023/2º	<b>Carga horária total - Docente: 108:00 horas/semestre</b> <b>Média semanal: 07:12 horas / semana</b>				

### 2.2. Pós-Graduação

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 era oferecida a cada dois anos, entretanto, devido ao número de docentes reduzido desde 2022 para ministrarem as disciplinas obrigatórias dos cursos de graduação do IFSC, o professor foi designado a ministrar as disciplinas Laboratório de Física Geral I e II no 1º e 2º. semestres de 2023, respectivamente. A pedido dos alunos de pós-graduação, manifestou interesse em ministrar a disciplina no 1º semestre de 2024, contudo, a comissão de distribuição didática atribuiu a disciplina a outro docente.

## 3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E SERVIÇOS À COMUNIDADE

### 3.1 Programa Unificado de Bolsas de Estudos

Desde 2015, o docente tem trabalhado a convite da Profa. Leila Beltramini (Coordenadora de Educação e Difusão do Conhecimento do CIBFar/CEPID) como coordenador em 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 2023, foram contempladas 4 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



## 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](mailto:cert@usp.br)

importante instrumento de divulgação dos conhecimentos gerados pela Coordenação de Educação e Difusão do Conhecimento em Ciências do CIBFar.

### 3.2 Participação em bancas

Em 2022, participou como membro titular de 3 bancas de qualificação de doutorado (ICB-USP, Fiocruz-RJ, IQ-UNESP), 3 bancas de tese de doutorado (Faculdade de Farmácia – UFG; FCF – UNESP; FCF – UNESP).

### 3.3 Membro de corpo editorial

Em 2022, foi convidado pela Profa. Paula Gomes da Universidade do Porto – Portugal para editar um número especial intitulado “[Antimalarial Chemotherapy in the XXIst Century](#)” sobre o desenvolvimento de novos antimaláricos. Dado o sucesso dessa iniciativa, foi convidado para editar um segundo volume do tópico. Dessa forma, foi editor do volume II do número especial da *Frontiers in Pharmacology* intitulado “[Antimalarial Chemotherapy in the XXIst Century – Volume II](#)”. O volume II do número especial contou com 5 artigos, incluindo um editorial, um artigo 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 janeiro/2023, aproximadamente, 10.400 visualizações e mais de 2.100 downloads foram registrados na página do número especial. Por fim, faz parte do 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 do 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, sua função foi coordenar os editais do processo seletivo bem como selecionar os estudantes de acordo com os critérios estabelecidos pela Comissão Interna. Esses 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. 7) Prioridade aos alunos que tenham obtido maior média (em nível de graduação) na disciplina escolhida para o estágio PAE. Em 2023, o IFSC-USP foi contemplado com 36 bolsas do PAE (16 bolsas no 1º semestre e 20 bolsas no 2º semestre).

## 5 RECURSOS FINANCEIROS – PROJETO 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, foi 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, contribui como Pesquisador Principal em projetos e redes de pesquisa com



## 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](mailto:cert@usp.br)

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). Atuou também como Pesquisador Associado do Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos (CIBFar/CEPID 2013/7600-3) e foi pesquisador associado 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 4 processos FAPESP (1 relatório de mestrado, 1 relatório de iniciação científica e 1 pedido para participação em evento internacional, 1 pedido inicial de bolsa de pós-doutorado).

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.

**Prof. Dr. TITO JOSÉ 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 Cenpes/Petrobras e Universidades Brasileiras e Estrangeiras. O objetivo principal do projeto visa o estudo da dinâmica de moléculas 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 perfilagem de poços de petróleo).

No caso dos magnetos unilaterais, foi desenvolvido, 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 laboratório para montagem de um simulador de ferramenta de perfilagem de poço de petróleo em condições de Logging-While-Drilling, onde as medidas são realizadas durante a perfuração do poço, com a ferramenta continuamente em movimento. Esta nova infraestrutura fez com que o projeto submetido à Petrobras fosse considerado prioritário pela empresa, sendo aprovado e estendido para o período de 01/12/2020 a 24/03/2024, tal como acima descrito (Projeto: “Estudo de Rochas Reservatório por Ressonância Magnética Nuclear – 1”)

Para melhor entender os dados de RMN, foram utilizados, adicionalmente, dados provenientes de outras técnicas experimentais, destacando a microtomografia tridimensional por raios-x (disponível no laboratório, com resolução de ~1µm), permeamtria (disponível no laboratório), porosimetria e petrofísica básica (que fornece dados estruturais e de composição dos materiais, incluindo 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](mailto:cert@usp.br)

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 perfilagem de potenciais reservatórios de petróleo, está sendo desenvolvido programas com uma abordagem físico-computacional, que inclui conceitos de mecânica dos fluídos 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, foi estabelecida parceria com o Grupo do Prof. Ricardo Ivan Ferreira da Trindade, do IAG/USP.

Estabelecida a colaboração envolvendo o emprego de RMN para o estudo de Ecocimentos, em parceria com o Prof. Vanderley M. John (EP/USP). Fruto dessa colaboração, foi gerada uma metodologia de análise do cimento que está sendo a base para a criação de uma eventual Startup.

Adicionalmente, a colaboração com o CNPEM/LNLS, com destaque para Linha Mogno, dedicada a técnicas de nano e microtomografia (CT). No momento, está sendo desenvolvido 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, dando atenção especial para estudos que envolvem armazenamento de CO<sub>2</sub> em formações geológicas. Este projeto está tendo desenvolvimento acelerado com a contratação de um dos ex-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: 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.

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, culminando com o recente lançamento do equipamento no mercado.

Recentemente, foi consolidada uma importante parceria com a Saint Gobain do Brasil 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**

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 de RMN, atendendo a uma demanda do CNPq para acelerar esta linha de pesquisa no país.

Para essa finalidade, foi estabelecida frutífera colaboração com colegas do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF) e do Departamento de Física da UFES. Desde 2004, houve enorme evolução nesta complexa área de pesquisa, com a publicação de vários artigos de relevo em revistas de alto fator de impacto e do 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 em 09/06/2022, foi introduzido, de forma original e 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.



## 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](mailto:cert@usp.br)

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, foi disponibilizado os espectrômetros de RMN para uso, como um Computador Quântico, no mesmo estilo dos computadores quânticos já disponibilizados por grandes empresas. Para essa finalidade, está sendo consolidada uma interface que traduz o algoritmo quântico a ser implementado pelo usuário do Computador Quântico no experimento de RMN a ser realizado. [A esse computador quântico, demos o nome de "Gatinho Feio".](#)

### 2.1. Produção científica

Artigos publicados

1) Consuelo-Leal, A.; Araujo-Ferreira, A.G.; Lucas-Oliveira, E.; Bonagamba, T.J.; Auccaise, R.; NMR Relaxation by Redfield equation in a spin system  $I=7/2$ ; Journal of Magnetic Resonance; 349, **2023. (Projeto LEAR)**

2) Ferreira, M.E.; Del Grande, M.R.; Ferreira, R.N.B.; da Silva, A.F.; da Silva, M.N.P.; Tirapu-Azpiroz, J.; Lucas-Oliveira, E.; Ferreira, A.G.D.; Soares, R.; Eckardt, C.B.; Bonagamba, T.J.; Steiner, M.; Full scale, microscopically resolved tomographies of sandstone and carbonate rocks augmented by experimental porosity and permeability values; Scientific Data; 10, **2023. (Colaboração com IBM)**

3) Lucas-Oliveira, E.; Jácomo, M.H.; Marassi, A.G.; da Trindade, R.; Bonagamba, T.J.; Study of the correlation between magnetic susceptibility and NMR relaxation using T2-filtered and T1-weighted CPMG; Geoenery Science and Engineering; 225, **2023. (Colaboração com IAG/USP)**

4) Marassi, A.G.; de Araújo-Ferreira, A.G.; Lucas-Oliveira, E.; Vidoto, E.L.G.; de Amorim, A.D.F.; Trevizan, W.A.; Bonagamba, T.J.; Transverse relaxation measurements for moving samples in the presence of strong magnetic field gradients; Journal of Magnetic Resonance; 354, **2023. (Colaboração com Cenpes/Petrobras)**

5) Moraes, M.M.; Lucas-Oliveira, E.; Bonagamba, T.J.; Aum, P.T.P.; Lucas, C.R.D.; da Silva, D.N.N.; Fortulan, C.A.; Fabrication and petrophysical characterization of artificial carbonate rocks with multiscale porosity sintered in a CO<sub>2</sub> atmosphere; Geoenery Science and Engineering; 229, **2023. (Colaboração com EESC/USP e UFPA)**

6) Pinto, J. C.; Lucas-Oliveira, E.; Bonagamba, T.J.; Guerreiro-Tanomaru, J.M.; Tanomaru, M.; Effect of Voxel Size of Micro-CT on the Assessment of Root Canal Preparation; Odovtos International Journal of Dental Sciences; 25, 93-102, **2023. (Colaboração com Faculdade de Odontologia – UNESP/Bauru)**

**Artigo completo publicado no Proceedings- 2023 IEEE International Ultrasonics Symposium**

1) Uliana, J.H.; Lucas-Oliveira, E.; Araujo-Ferreira, A.G.; Trevizan, W.A.; Pavan, T.Z.; Bonagamba, T.J.; Carneiro, A.A.O.; Photoacoustic microscopy of sandstone reservoirs rocks; IEEE International Ultrasonics Symposium, **2023. (Colaboração com Cenpes/Petrobras e FFCLRP/USP)**

### 2.2. Orientações

**Trabalhos de Conclusão de Curso**

- Edgar Salgado Silva

Projeto: "Magneto no Arranjo de Halbach – Protótipo para Ressonância Magnética Nuclear" **(Parceria com o CNPEM)**

- Nataly de Melo Campo **(também aluna de IC, com bolsa ANP/Cenpes/Petrobras)**

Projeto: "Estudo da migração de moléculas de fluidos em meios porosos – uma aplicação 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](mailto:cert@usp.br)

técnica T2-T2 Exchange”

### **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

- Luis Augusto Pereira

Projeto de Mestrado: “Estudo por RMN do mecanismo de secagem de diferentes formulações de argamassas utilizadas na construção civil”

Início: 03/2022

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

### **Mestrado finalizado**

- 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

Término: 04/2023

Programa de Pós-Graduação em Física – Teórica e Experimental - IFSC/USP

### **Doutorado em andamento – com recente trancamento de matrícula.**

Ruan Felipe de Oliveira Neves

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

Agência financiadora: sem bolsa

Início: 07/2021 (matrícula)

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

### **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

## **2 ATIVIDADES DE ENSINO**

### **2.1. Graduação**

Laboratório de Física Geral I – Engenharia Aeronáutica, Civil e de Computação (primeiro semestre)

Laboratório de Física Geral II – Engenharia Aeronáutica, Civil e de Computação (segundo semestre)

### **2.2. Pós-graduação**

Nada a declarar.



### 2.3. Cursos extra-curriculares

Nada a declarar.

## 3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E SERVIÇOS À COMUNIDADE

**Coordenação do Centro de Inovação da USP - Complexo São Carlos:** Atividades de interação da USP com a Sociedade, em prol do desenvolvimento socioeconômico, visando o bem-estar da população e a preservação do meio ambiente, interagindo com todo o ecossistema de inovação e empreendedorismo, nos âmbitos municipal, estadual, federal, de caráter público ou privado, incluindo o poder legislativo.

Vide relatório de atividades referente a 2023: [Relatório - InovaUSP/SC - 2023](#)

## 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, coordenando 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 do Conselho de Curadores do Parqtec.

## 5 RECURSOS FINANCEIROS – PROJETO DE PESQUISA

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

Valor: R\$ 1.798.567,79.

Vigência: 01/12/2020 a 24/03/2024

Saint Gobain do Brasil: Estudo por RMN do mecanismo de secagem de diferentes formulações de argamassas utilizadas na construção civil.

Valor: R\$ 150.000,00 (para custeio e uma bolsa de mestrado)

**Observação: Tito J. Bonagamba não receberá remuneração.**

Vigência: 07/12/2023 a 06/12/2025

Bolsa de Produtividade CNPq – 1B

## 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 selecionadas

“NMR & 3D X-ray Microtomography Research at the Interface between Oil Exploration and Geological CO2 Storage”, [Practical Applications of NMR in Industry Conference](#), March/2023.

“Universidade & Sociedade - Ao interagirmos com a Sociedade estaremos oferecendo perspectivas futuras de Emprego para nossa Comunidade Discente fora da Academia?”, Semana da Pós-Graduação do campus São Carlos 2023, março/23.

“Palestra de lançamento do InovaUSP – Complexo São Carlos, evento que ocorreu no SENAI/SC, abril/2023. (<https://jornal.usp.br/institucional/usp-lanca-polo-do-centro-de-inovacao-da-usp-na-cidade-de-sao-carlos/>)



## 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](mailto:cert@usp.br)

“Informação e Computação Quântica: uma história para contar - RMN & RQN”, 1º Workshop em Tecnologias Quânticas, maio/23.

“Computação Quântica, São Carlos Experience (a convite do SENAI/SC), outubro/23.

“InovaUSP – Complexo São Carlos, São Carlos Experience (a convite do SEBRAE/SC), outubro/23.

São Carlos – Capital da Tecnologia: a Cidade da Inovação – contextualização histórica, São Carlos Experience, outubro/23.

Inúmeras palestras sobre as ações do InovaUSP, em várias instituições e para visitantes ao Centro de Inovação da USP – Complexo São Carlos.

### 7 Conclusões

O professor procura contribuir para o 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**, é oferecido disciplinas de Laboratório de Física Geral I e II para alunos do Curso de Engenharia Aeronáutica, desde o segundo semestre de 2018. Houve empenho em 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, foi incluído temas de interesse da aeronáutica relacionados com os tópicos de física estudados. De forma complementar, em parceria com professores do SAA, foi oferecido aulas especiais que associam física à aeronáutica. Como resultado, foi recebido dos alunos ingressantes, através da Secretaria Acadêmica da Engenharia Aeronáutica (SAAero), 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. Infelizmente, a SAAero descontinuou as avaliações dos docentes.

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

**Na área de pesquisa**, tem 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, houve bons resultados, e sempre há busca por parcerias com instituições de ensino e pesquisa e empresas de relevo na área. Para o estabelecimento de uma rede de colaborações, ocorre visitas à essas instituições e foi criada 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, o docente tem sido convidado como palestrante em eventos internacionais e nacionais.

Foram recebidos os visitantes estrangeiros descritos abaixo:

Martin Alberto Diaz Viera, Instituto Mexicano del Petróleo, de 02/10/2023 a 07/10/2023

Matthew Paul Augustine, UC Davis - Estados Unidos, de 02/10/2023 a 04/10/2023

Sinai Morales Chavez, Instituto Mexicano del Petróleo, 11/09/2023 a 04/12/2023 (aluno mexicano de Doutorado)

Finalmente, o docente foi honrosamente convidado para ser membro da equipe de Guest Editors



## 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](mailto:cert@usp.br)

for a [JMR-Open](#) Special Issue on “Magnetic Resonance in Latin America”, fascículo ainda em consolidação, e do Comitê Científico da [Practical Applications of NMR in Industry Conference](#) (com início em 2023).

Atualmente, tem projetos com: i) Cenpes/Petrobras, envolvendo medidas de RMN em condições de perfuração de poços de petróleo e considerado de alta prioridade pela Petrobras; ii) empresa FIT - Fine Instrument Technology, envolvendo o desenvolvimento, construção e comercialização de um equipamento de RMN e software para processamento de sinais dedicados ao estudo de meios porosos; e, iii) Saint-Gobain do Brasil, para o estudo por RMN do mecanismo de secagem de diferentes formulações de argamassas utilizadas na construção civil

**No caso de gestão**, tem 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.

Enfim, o docente julga estar realizando seu papel acadêmico com ações de ensino, pesquisa, extensão, gestão e internacionalização com mentalidade aberta, reconhecendo o papel da universidade para o desenvolvimento socioeconômico do País, respeitando e integrando todas as áreas do conhecimento.

Com base nas informações apresentadas, é notório o desempenho satisfatório das funções regulares na USP, que ocorrem em perfeita comunhão com as simultâneas, já que, a forma de atuação, não se distinguem, pelo contrário, se harmonizam para o bem da universidade e da sociedade.

Os dados e atividades dos docentes com credenciamento CERT vigente em 2023 e que não exerceram atividades simultâneas estão disponíveis para consulta na Plataforma Lattes do CNPq, a saber:

**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 21/02/2024.



**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](mailto:cert@usp.br)

## COMISSÃO ESPECIAL DE REGIMES DE TRABALHO

### Segunda parte

<b>Docente:</b> Adriano Defini Andricopulo		
<b>Parecer CERT número:</b> 271/2023	<b>Credenciamento Válido:</b> 23/04/2023 a 23/04/2025	
<b>Instituição:</b> DNDi (42230 M)		
<b>Atividade:</b> Coordenação		
<b>Período da Atividade</b> 01/01/2023 a 31/12/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> -	<b>Artigo 19 - 20 – 21</b> 19

<b>Docente:</b> Alberto Tannús		
<b>Parecer CERT número:</b> 52/2022	<b>Credenciamento Válido:</b> 08/03/2022 a 08/03/2024	
<b>Instituição:</b> Universidade de Minnesota (41778 M)		
<b>Atividade:</b> Coordenação		
<b>Período da Atividade</b> 01/01/2023 a 31/12/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> -	<b>Artigo 19 - 20 – 21</b> 19

<b>Docente:</b> Alberto Tannús		
<b>Parecer CERT número:</b> 52/2022	<b>Credenciamento Válido:</b> 08/03/2022 a 08/03/2024	
<b>Instituição:</b> Universidade de Minnesota (41778 M)		
<b>Atividade:</b> Assessoria		
<b>Período da Atividade</b> 01/01/2023 a 31/12/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> 0,5 (meia) hora semanal	<b>Artigo 19 - 20 – 21</b> 20

<b>Docente:</b> Alessandro Silva Nascimento		
<b>Parecer CERT número:</b> 37/2019	<b>Credenciamento Válido:</b> 04/05/2023 a 04/05/2025	
<b>Instituição:</b> BRASKEM (com a interveniência da Fundação de Apoio à Física e à Química - FAFQ)		
<b>Atividade:</b> Assessoria		
<b>Período da Atividade</b> 01/01/2023 a 31/03/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> 01 (uma) hora semanal	<b>Artigo 19 - 20 – 21</b> 20

<b>Docente:</b> Alessandro Silva Nascimento		
<b>Parecer CERT número:</b> 37/2019	<b>Credenciamento Válido:</b> 04/05/2023 a 04/05/2025	
<b>Instituição:</b> Instituto Vita Nova (com a interveniência da Fundação de Apoio à Física e à Química - FAFQ)		
<b>Atividade:</b> Assessoria		
<b>Período da Atividade</b> 01/11/2023 a 31/12/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> 07 (sete) horas semanais	<b>Artigo 19 - 20 – 21</b> 20



**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](mailto:cert@usp.br)

<b>Docente:</b> Andre Luiz Bertelli Ambrosio		
<b>Parecer CERT número:</b> 634/2023	<b>Credenciamento Válido:</b> 15/05/2023 a 15/05/2025	
<b>Instituição:</b> Laboratório Nacional de Biociências (LNBio/CNPEM)		
<b>Atividade:</b> Assessoria		
<b>Período da Atividade</b> 01/07/2023 a 31/12/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> 08 (oito) horas semanais	<b>Artigo 19 - 20 – 21</b> 20

<b>Docente:</b> Eduardo Ribeiro de Azevêdo		
<b>Parecer CERT número:</b> 1071/2023	<b>Credenciamento Válido:</b> 19/10/2023 a 19/10/2025	
<b>Instituição:</b> PETROBRAS (1013991 M)		
<b>Atividade:</b> Coordenação		
<b>Período da Atividade</b> 01/01/2023 a 31/12/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> -	<b>Artigo 19 - 20 – 21</b> 19

<b>Docente:</b> Hellmut Eckert		
<b>Parecer CERT número:</b> 1421/2022	<b>Credenciamento Válido:</b> 22/11/2022 a 22/11/2024	
<b>Instituição:</b> Nippon Electric Glass Co., Ltd. (1013109 P)		
<b>Atividade:</b> Coordenação		
<b>Período da Atividade</b> 01/01/2023 a 31/12/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> -	<b>Artigo 19 - 20 – 21</b> 19

<b>Docente:</b> Hellmut Eckert		
<b>Parecer CERT número:</b> 1421/2022	<b>Credenciamento Válido:</b> 22/11/2022 a 22/11/2024	
<b>Instituição:</b> Nippon Electric Glass Co., Ltd. (1013109 P)		
<b>Atividade:</b> Assessoria		
<b>Período da Atividade</b> 01/01/2023 a 31/12/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> 01 (uma) hora semanal	<b>Artigo 19 - 20 – 21</b> 20

<b>Docente:</b> Rafael Victório Carvalho Guido		
<b>Parecer CERT número:</b> 709/2022	<b>Credenciamento Válido:</b> 27/08/2022 a 27/08/2024	
<b>Instituição:</b> MMV (42230 M)		
<b>Atividade:</b> Coordenação		
<b>Período da Atividade</b> 01/01/2023 a 31/12/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> -	<b>Artigo 19 - 20 – 21</b> 19



**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](mailto:cert@usp.br)

<b>Docente:</b> Rafael Victório Carvalho Guido		
<b>Parecer CERT número:</b> 709/2022		<b>Credenciamento Válido:</b> 27/08/2022 a 27/08/2024
<b>Instituição:</b> MMV e CEPEM (41659 M)		
<b>Atividade:</b> Coordenação		
<b>Período da Atividade</b> 01/01/2023 a 31/12/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> -	<b>Artigo 19 - 20 - 21</b> 19

<b>Docente:</b> Tito José Bonagamba		
<b>Parecer CERT número:</b> 1422/2022		<b>Credenciamento Válido:</b> 11/12/2022 a 11/12/2024
<b>Instituição:</b> PETROBRAS (1012374 M)		
<b>Atividade:</b> Coordenação		
<b>Período da Atividade</b> 01/01/2023 a 31/12/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> -	<b>Artigo 19 - 20 - 21</b> 19

<b>Docente:</b> Tito José Bonagamba		
<b>Parecer CERT número:</b> 1422/2022		<b>Credenciamento Válido:</b> 11/12/2022 a 11/12/2024
<b>Instituição:</b> FIT Indústria e Comércio de Equipamentos Eletrônicos Ltda (1014176 P)		
<b>Atividade:</b> Coordenação		
<b>Período da Atividade</b> 01/01/2023 a 20/09/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> -	<b>Artigo 19 - 20 - 21</b> 19

<b>Docente:</b> Tito José Bonagamba		
<b>Parecer CERT número:</b> 1422/2022		<b>Credenciamento Válido:</b> 11/12/2022 a 11/12/2024
<b>Instituição:</b> Saint-Gobain do Brasil Produtos Industriais e para Construção (1016629 P)		
<b>Atividade:</b> Coordenação		
<b>Período da Atividade</b> 07/12/2023 a 31/12/2023	<b>Nº de Horas semanal, semestral ou anual</b> -	<b>Artigo 19 - 20 - 21</b> 19

**Assinado via USP Assina**

Prof. Dr. Adriano Defini Andricopulo  
Chefe do Departamento de Física e Ciência Interdisciplinar  
FCI/IFSC/USP



## 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 LJNK-K74Z-UFB9-F81R no seguinte link: <https://portalservicos.usp.br/iddigital/LJNK-K74Z-UFB9-F81R>

#### **Adriano Defini Andricopulo**

**Nº USP:** 4998918

**Data:** 15/03/2024 22:22

**Perfil assinante::** Chefe do Departamento de Física e Ciência Interdisciplinar



## UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

COMISSÃO ESPECIAL DE REGIMES DE TRABALHO

Rua da Praça do Relógio, 109 bloco K, 5º andar (salas 502 a 507)

Cidade Universitária - São Paulo, SP

Tel.: (011) 3091.2099 / 3091.3411

E-mail: cert@usp.br Site: <https://sites.usp.br/cert/>

231

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 2023.

### PARECER CERT nº 332/2025

A CERT, em reunião de 10/03/2025, 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, 17 de março de 2025.

  
Anna Helena Reali Costa  
Presidente