

NEQUIMED 20 anos: ciência, formação e inovação a serviço da saúde

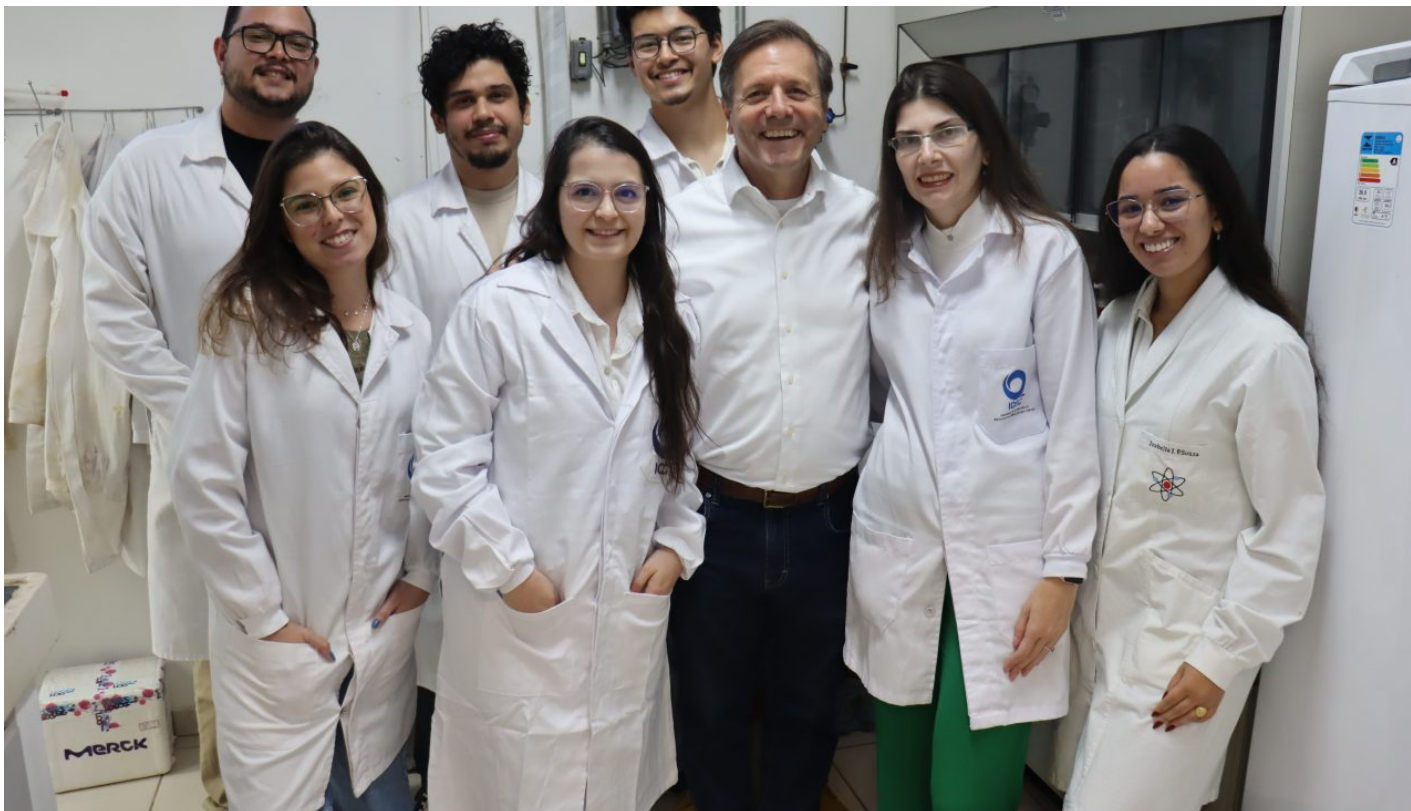


Foto: Henrique Fontes/IQSC

O avanço da ciência, o desenvolvimento de fármacos e a formação de profissionais qualificados são pilares fundamentais para garantir a saúde da população. É nesse cenário que, em 2025, o **Grupo de Pesquisa em Química Medicinal e Biológica (NEQUIMED)**, do **Instituto de Química de São Carlos (IQSC-USP)**, **celebra 20 anos** de atuação científica de excelência, com destaque para sua contribuição à descoberta de novas moléculas com potencial terapêutico, especialmente no combate a doenças negligenciadas, câncer e infecções virais.

Fundado em maio de 2005, o **NEQUIMED consolidou-se como referência nacional e internacional em pesquisa interdisciplinar**, integrando química, biologia e, mais recentemente, técnicas de Inteligência Artificial, com o objetivo de encontrar soluções reais para problemas urgentes de saúde pública. O grupo é responsável pela descoberta de dois novos candidatos a fármacos voltados ao tratamento da doença de Chagas e da COVID-19, entre outras importantes contribuições científicas.

"A área de medicamentos é vital para qualquer país. Ela é, inclusive, uma questão de segurança nacional. A independência em termos de produção e desenvolvimento de fármacos é estratégica, pois está diretamente relacionada ao cuidado com a própria população", afirma o vice-diretor do IQSC **Carlos Alberto Montanari**, fundador e atual coordenador do grupo.

Atualmente, o NEQUIMED é formado por uma equipe multidisciplinar e colaborativa composta por **12 membros ativos**, entre professores, pesquisadores visitantes, pós-doutorandos e alunos em diferentes níveis de formação acadêmica. O grupo também possui colaborações estrangeiras com pesquisadores da Alemanha, em Bonn, Heidelberg e Münster com 3 especialistas em química medicinal sintética e computacional. A estrutura do grupo reflete seu compromisso com a integração entre ensino e pesquisa, abrigando **estudantes de doutorado, mestrado, iniciação científica e acompanhantes de graduação** que atuam lado a lado com docentes e acadêmicos experientes.

O time mantém uma dinâmica de trabalho altamente colaborativa, em que o conhecimento circula de forma horizontal e cada integrante contribui para o avanço dos projetos e para a consolidação do NEQUIMED como um dos principais núcleos de Química Medicinal da América Latina.

Com mais de **80 artigos científicos publicados** em duas décadas de história e média de cinco publicações por ano, ele também se destaca pela formação de estudantes, pesquisadores e colaboradores. Muitos deles hoje estão inseridos em posições-chave da área acadêmica de Química Medicinal e laboratórios na indústria farmacêutica, tanto dentro quanto fora do Brasil.

Além disso, a equipe desempenha papel central na **gênese planejada de novos fármacos**, utilizando abordagens modernas de **modelagem molecular, quiminformática, QSAR 3D e biocalorimetria**, que permitem otimizar as propriedades farmacodinâmicas e farmacocinéticas de compostos desde as etapas iniciais de pesquisa.

Química Medicinal no Brasil: a contribuição pioneira de Carlos Alberto Montanari

A história da Química Medicinal no Brasil é relativamente recente e marcada por desafios, pioneirismo e avanços significativos nas últimas décadas. Até o final do século XX, predominavam no país pesquisas voltadas à **química de produtos naturais bioativos, síntese química e ensaios farmacológicos**, com pouca articulação entre essas áreas e uma abordagem sistemática voltada ao **planejamento de fármacos**.

Foi apenas a partir da década de 1980 que começaram a surgir, de forma mais visível, contribuições de pesquisadores brasileiros trabalhando com ferramentas da Química Medicinal. Ainda assim, o número de publicações e grupos especializados era pequeno, e a área carecia de estrutura institucional dentro da comunidade científica nacional.



Foto: Marcos Santos/USP Imagens

Esse cenário começou a mudar na década seguinte. Em **1993**, em resposta ao interesse crescente de pesquisadores brasileiros e como parte da reestruturação temática da **Sociedade Brasileira de Química (SBQ)**, foi criada a **Seção Relações Quantitativas Estrutura-Atividade (SA)** – uma iniciativa pioneira que introduziu formalmente no país o conceito de estrutura-fármaco e a aplicação de métodos computacionais para estudar as interações entre substâncias químicas e alvos biológicos.

Esse foi um marco importante para a comunidade. Em **1998**, a SA evoluiu e passou a se chamar **Divisão de Química Medicinal (MED)**, reflexo da consolidação de uma massa crítica de pesquisadores brasileiros atuando na área. Entre os protagonistas dessa mudança estava **Carlos Alberto Montanari**, que assumiu a diretoria da nova divisão.

"Eu me tornei diretor dessa divisão da SBQ. A gente já tinha uma massa crítica considerável e importante, o que nos permitiu ampliar a atuação e consolidar a Divisão de Química Medicinal, que existe até hoje", relembra o químico de formação.

Na época, Montanari era professor no **Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG)**, onde já desenvolvia pesquisas com foco em **doenças negligenciadas**, especialmente buscando pequenas moléculas ativas contra **leishmaniose**, em colaboração com grupos especializados em farmacologia e biologia de parasitos.

Sua experiência acumulada em Minas Gerais foi decisiva para um novo capítulo da Química Medicinal no Brasil. Em **2005**, dois anos após obter sua livre-docência pela USP, Montanari fundaria o **NEQUIMED**, o **primeiro grupo estruturado em Química Medicinal da USP São Carlos**.

"Eu vim para São Carlos, onde não existia qualquer grupo de Química Medicinal. Já tinha experiência no departamento da UFMG e vim com a missão de criar uma área de pesquisa aqui. Naquela época, era eu, meus alunos e uma salinha", conta.

Evolução do NEQUIMED: de duas salas a um centro de excelência em Química Medicinal

A consolidação da Química Medicinal como campo estratégico no Brasil não aconteceu apenas no plano conceitual, mas também exigiu investimento contínuo em estrutura física, equipamentos de ponta e formação técnica qualificada. No caso do NEQUIMED, a evolução ao longo dos anos reflete exatamente esse caminho: de um núcleo pequeno e promissor para um grupo multidisciplinar reconhecido internacionalmente.

Quem acompanhou de perto essa transformação foi **Fabiana Rosini**, que atua no NEQUIMED desde 2009 e é atualmente a **responsável técnica do laboratório**. Ao relembrear os primeiros anos, ela destaca como o espaço físico e a capacidade experimental do grupo se transformaram radicalmente.

"A evolução foi muito grande. Quando cheguei em 2009, o laboratório era muito pequeno, com apenas duas salas. A gente comprava as moléculas que seriam testadas. Havia apenas algumas alunas começando a trabalhar com expressão de proteínas, e comecei a acompanhá-las nos processos de expressão e purificação", relata a pesquisadora.



Foto: Henrique Fontes/IQSC

Foi entre **2011 e 2012** que o NEQUIMED deu um salto qualitativo, com a formação da vertente de **química sintética**, responsável por desenvolver internamente os compostos a serem estudados. Nesse momento, o time passou a trabalhar de forma integrada entre modelagem molecular, síntese e biologia química – o que permitiu o avanço em projetos que

analisam a interação entre proteínas e ligantes, passo fundamental na descoberta de fármacos.

A estrutura do laboratório se expandiu significativamente com a aprovação de um **projeto temático da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) em 2013**, que possibilitou a aquisição de **novos equipamentos de alta complexidade** e a **expansão da equipe**, com a chegada de alunos de pós-graduação, pesquisadores de pós-doutorado e novos colaboradores.

"Foi um divisor de águas para o grupo. Passamos a contar com infraestrutura adequada para ensaios mais complexos e com um número maior de pesquisadores, o que acelerou muito nosso ritmo de produção científica", explica Fabiana.

Entre os marcos científicos que marcaram sua trajetória no grupo, ela destaca a incorporação dos **ensaios de calorimetria isotérmica (ITC)** como ferramenta central para a caracterização das interações proteína-ligante.

"Com esse tipo de experimento, conseguimos obter o perfil termodinâmico completo da interação entre a proteína-alvo e o ligante. A partir de um único experimento, temos uma assinatura completa da interação biomolecular – conseguimos avaliar, com precisão, se a interação é eficiente e se aquela molécula deve seguir para fases mais avançadas do estudo", detalha a pesquisadora do NEQUIMED.

A adoção dessa tecnologia permitiu ao grupo avançar ainda mais na **integração entre planejamento computacional, síntese e avaliação experimental**, consolidando-o como um polo de inovação na **ciência translacional** – aquela que liga a bancada ao tratamento, do laboratório ao leito clínico.

Formação de cientistas: uma marca duradoura do NEQUIMED

Hoje, passados 20 anos desde sua fundação, o NEQUIMED conta com uma estrutura laboratorial sólida, integrada a plataformas computacionais de última geração e capaz de formar profissionais altamente especializados em todas as etapas do desenvolvimento racional de fármacos. A infraestrutura do IQSC, aliada à sua Central Analítica (CAQI) e ao corpo técnico especializado, exerceu papel fundamental na consolidação das atividades de pesquisa.

A influência do grupo se reflete na trajetória de dezenas de ex-alunos que hoje ocupam posições de destaque em instituições de pesquisa e ensino, sejam no Brasil ou no exterior. Um exemplo dessa formação é **Geraldo Rodrigues Sartori**, atual **professor do Instituto de Física de São Carlos (IFSC-USP)** e que integrou o NEQUIMED por uma década, entre 2007 e 2017, realizando sua iniciação científica, mestrado e doutorado no grupo.

"Minha experiência no NEQUIMED teve um saldo bastante positivo. Além de crescer profissionalmente ao discutir desafios com pessoas que são referência na área, pude construir uma rede de contatos sólida. O rigor técnico e científico que permeia o laboratório, uma característica do Prof. Montanari, foi essencial para a construção do meu senso crítico e de uma metodologia científica que fundamenta minha carreira", afirma Sartori.

Para ele, o grupo foi mais do que um laboratório: foi uma escola de pensamento. A liberdade para propor ideias, a convivência com pesquisadores de diferentes áreas e a cultura de debate criaram um ambiente de formação científica verdadeiramente inter, multi e transdisciplinar. Tal pluralidade permitiu aos integrantes da equipe transitar entre fronteiras do conhecimento com naturalidade – um diferencial notável em tempos de ciência cada vez mais integrada.

"Tudo isso me faz ser o cientista que sou hoje, e não tenho dúvidas de que minha experiência no NEQUIMED, sendo orientado pelo Prof. Montanari, foi essencial para isso", confirma o professor Geraldo.

Sartori lembra com carinho de vários momentos marcantes vividos no grupo, como a **etapa de expansão da área de Biologia Molecular**, na qual os próprios alunos participaram do planejamento e da transformação de um antigo depósito em um novo laboratório. Outro destaque foi o estabelecimento da **parceria com o Centro de Ciências Biomoleculares da Universidade de Nottingham**, no Reino Unido, que possibilitou a ele um estágio sanduíche na Inglaterra, ampliando sua perspectiva internacional.

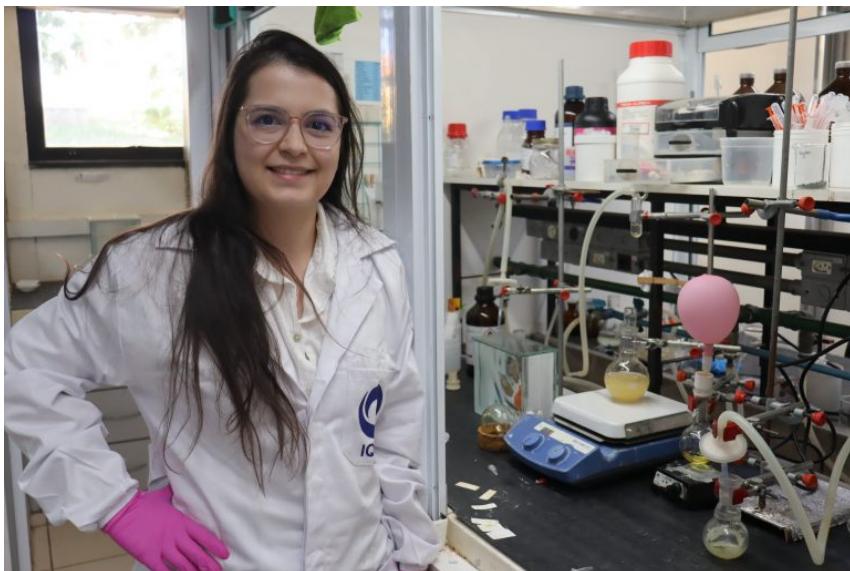


Foto: Henrique Fontes/IQSC

Mais do que um centro de pesquisa em Química Medicinal, o NEQUIMED consolidou-se como um **espaço formador de cientistas completos**, capazes de atuar em ambientes acadêmicos, industriais e institucionais com excelência técnica e visão estratégica. Combinando rigor metodológico, interdisciplinaridade e forte estímulo à autonomia intelectual, ele se tornou referência na formação de profissionais que hoje ocupam posições de destaque em universidades, centros de pesquisa e empresas no Brasil e no exterior.

"O NEQUIMED proporciona uma ambiência científica única e com alto rigor, o que permite aos alunos e pós-docs uma formação sólida tanto científica quanto gerencial. Isso explica por que tantos egressos do grupo alcançaram posições de destaque. Essa mesma cultura influenciou a minha própria exigência quanto à qualidade dos artigos que produzo hoje", destaca Sartori.

Colaborações com o grupo do IQSC

O NEQUIMED possui **colaborações consolidadas** com instituições nacionais de referência, como a **Faculdade de Medicina da USP, em Ribeirão Preto**, a **Fundação Oswaldo Cruz (Fiocruz)**, o **Instituto de Ciências Biomédicas da USP** e as **Faculdades de Ciências Farmacêuticas de São Paulo e Ribeirão Preto**. No exterior, a interação com centros alemães vem contribuindo com o uso de **aprendizado de máquina e IA** para a geração de novos modelos matemáticos que auxiliam na triagem de bilhões de moléculas químicas em busca de novos candidatos a fármacos.

"Bancos de dados públicos, com seus bilhões de substâncias químicas, juntamente com as coleções de compostos desenvolvidos internamente, constituem o arsenal fundamental e o ponto de partida para as estratégias de triagem virtual, modelagem molecular e análise de dados que visam identificar, validar e qualificar novas entidades químicas com potencial bioativo", explica Montanari.

Ao celebrar 20 anos de trajetória, o NEQUIMED reforça seu compromisso com três pilares fundamentais:

1. **Formação de profissionais altamente capacitados**, com responsabilidade ética e científica;
2. **Construção de capacidade instalada em química medicinal**, fortalecendo a base científica e tecnológica nacional;
3. **Avanços em terapias globais**, especialmente no enfrentamento de doenças que atingem populações vulneráveis em países de baixa e média renda.

Com os olhos voltados para o futuro, o NEQUIMED reafirma sua missão de expandir os horizontes da ciência aplicada à saúde, mantendo a excelência acadêmica e a responsabilidade social como norte de sua atuação.

"Hoje, o NEQUIMED se encontra em um novo momento: buscamos parcerias com a indústria farmacêutica para levar nossas descobertas às etapas finais de ensaios pré-clínicos e, futuramente, aos ensaios clínicos", conclui Montanari.

NEQUIMED como espaço de formação científica e transformação pessoal

Além de seus resultados técnicos e avanços na pesquisa de novas moléculas bioativas, o grupo se destaca por sua capacidade de transformar vidas por meio da ciência. A equipe do IQSC tem sido uma verdadeira escola de excelência, que acolheu e impulsionou a carreira de mais de 50 estudantes de todos os níveis.

Diversos ex-integrantes do NEQUIMED encontraram no grupo um ponto de inflexão em suas trajetórias acadêmicas e profissionais. É o caso de **Daniel Gedder Silva**, jovem pesquisador na FCFRP-USP, que passou pelo grupo durante o doutorado no Instituto de Química de São Carlos. Sua conexão com o laboratório surgiu de forma inesperada, durante um evento científico, e acabou se tornando decisiva para o rumo de sua carreira.

"Minha entrada no NEQUIMED redefiniu completamente minha trajetória", lembra Daniel. *"A oportunidade de participar do grupo me levou a trabalhar em projetos desafiadores e até a desenvolver parte da pesquisa nos Estados Unidos, o que resultou em uma patente e abriu portas para outros financiamentos",* completa ele, que participou do grupo de 2013 a 2017 quando fazia seu doutorado no IQSC.



Foto: Henrique Fontes/IQSC

O impacto da experiência foi além do aspecto técnico. Trabalhar em um projeto voltado à doença de Chagas, doença negligenciada que afeta principalmente países como o Brasil, reforçou nele uma percepção ampliada do papel social do cientista. *"Foi quando compreendi que fazer ciência é também buscar soluções para os problemas reais da sociedade",* confirma o pesquisador.

Para Daniel, um dos grandes diferenciais do grupo é justamente a formação crítica e engajada de seus integrantes. *"O NEQUIMED forma cientistas com visão ampla, capazes de pensar além da publicação. Não se trata apenas de gerar artigos, mas de produzir conhecimento sólido, com respaldo científico e impacto concreto",* avalia.

Ao lado de outros ex-alunos que hoje atuam em posições de liderança acadêmica e industrial, Daniel reforça o legado do grupo como espaço de excelência científica e transformação pessoal.

Para **Paulo da Conceição Matui**, aluno de iniciação científica no grupo, o contato com a Química Medicinal começou ainda durante o isolamento da pandemia de COVID-19, com um trabalho sobre reposicionamento de fármacos. A curiosidade despertada naquele momento o levou à pesquisa, e hoje ele atua com síntese orgânica de moléculas com potencial farmacológico, aprendendo na prática o que antes era apenas teoria.

"A importância de ter contato com a pesquisa científica desde cedo no NEQUIMED corrobora muito com minha formação. Desenvolvi tanto habilidades técnicas quanto interpessoais, como comunicação e trabalho em grupo. O laboratório funciona quase como uma linha de produção, o que ensina a ter organização e visão de processo", opina o estudante do 5º ano de Bacharelado em Química do IQSC.



Foto: Henrique Fontes/IQSC

Larissa Gaiola, doutoranda do grupo, teve uma trajetória marcada por superação: vinda de uma graduação onde enfrentou dificuldades em Química Orgânica, encontrou na Química Medicinal um campo que exigia justamente essa habilidade – e floresceu. Ao se aproximar da área farmacêutica, escolheu o NEQUIMED como espaço para aprofundar sua formação e concretizar seu desejo de atuar no desenvolvimento de fármacos.

“O salto na minha carreira foi enorme. Estar no NEQUIMED é saber que estou fazendo minha parte para um futuro melhor. Quando penso que podemos desenvolver algo mais eficiente e menos tóxico para doenças como a de Chagas, sinto que estou contribuindo com algo que pode mudar a realidade de uma sociedade”, destaca a integrante do grupo.

Bolsista de pós-doutorado, **Saulo de Tarso Alves dos Passos** conheceu o NEQUIMED ainda durante seu doutorado na Universidade de Brasília (UnB). Ao se mudar para o Sudeste, buscou o grupo pela reputação nacional e internacional. Hoje, desenvolve inibidores moleculares para alvos terapêuticos como a cruzaina, reforçando a interface entre química sintética, biológica e computacional.

“Todo químico medicinal conhece o NEQUIMED, que carrega uma trajetória muito importante, e o Prof. Montanari é referência. Aqui encontrei um ambiente altamente qualificado e humano”, relata o pesquisador.

Para **Evelin Cardoso**, doutoranda direta, o impacto do NEQUIMED foi ainda mais significativo: vinda de um campus pequeno da Universidade Federal Fluminense (UFF), em Volta Redonda, encontrou na USP e no grupo um ambiente de acolhimento e de aprendizado intensivo. Seu interesse original em Síntese Orgânica ganhou novos significados ao ver as moléculas que produzia sendo testadas contra diferentes alvos terapêuticos.

“A Química Medicinal que conhecemos hoje cresceu com o NEQUIMED. O Prof. Montanari reiniciou essa área no Brasil e é um grande expoente. Estar aqui transformou minha visão de ciência e ampliou minhas perspectivas profissionais”, confirma Evelin.



Foto: Henrique Fontes/IQSC

A trajetória de **Izabella Inocência Ferreira de Souza**, estudante do 2º ano do Bacharelado em Química do IQSC, ilustra como o NEQUIMED também inspira jovens talentos desde o início da graduação. Acompanhando de perto as atividades laboratoriais ao lado da pesquisadora Fabiana Rosini, ela relata a surpresa e o encantamento com a complexidade e a sofisticação dos processos de pesquisa.

“É muito interessante ver como são feitos os experimentos. Tem coisas que eu jamais imaginava que eram feitas daquela forma. Estou aprendendo muito e me sinto motivada a seguir na área”, expõe a estudante da USP São Carlos.

O piauiense **Fernando Barbosa**, estudante de mestrado, também chegou ao grupo guiado pela reputação científica do NEQUIMED. Inicialmente envolvido com síntese de inibidores, hoje ele atua também na avaliação bioquímica desses compostos – um exemplo claro da formação multidisciplinar oferecida pelo grupo.

“A possibilidade de fazer várias etapas do processo – desde a síntese até os ensaios – nos torna profissionais ainda mais completos. A química medicinal exige isso, e o NEQUIMED prepara a gente para atuar com competência e versatilidade”, analisa o pesquisador.

Essas histórias de transformação pessoal e profissional mostram que o NEQUIMED vai muito além da bancada. Com orientação firme, colaboração constante e espaço para autonomia e crescimento, o grupo consolida sua missão como um pilar estratégico na formação de cientistas brasileiros, e reafirma o papel central da universidade pública como motor de desenvolvimento científico, tecnológico e humano.



Foto: Henrique Fontes/IQSC

Evento on-line de comemoração aos 20 anos

Com os olhos voltados para o futuro, o NEQUIMED reafirma sua missão de **expandir os horizontes da ciência aplicada à saúde**, mantendo a **excelência acadêmica**, o **rigor científico e a responsabilidade social** como norte de sua atuação. Para celebrar suas duas décadas de contribuições à ciência brasileira e internacional, o **NEQUIMED** preparou uma programação especial de eventos comemorativos ao longo do ano.

A primeira atividade será o **SancaMedChem**, um **webinário gratuito**, que reunirá pesquisadores, ex-integrantes e especialistas da área no próximo **dia 2 de junho**, das **9h30 às 17h30**. Será uma oportunidade de compartilhar trajetórias, discutir avanços e refletir sobre os próximos passos da **Química Medicinal no Brasil e no mundo**.

Mais do que celebrar o passado, os 20 anos do NEQUIMED representam um **compromisso renovado com o futuro da ciência brasileira** – um futuro em que pesquisa, formação humana e inovação caminham juntas em benefício da sociedade.

Por Matheus Martins Fontes, da Fontes Comunicação Científica