

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

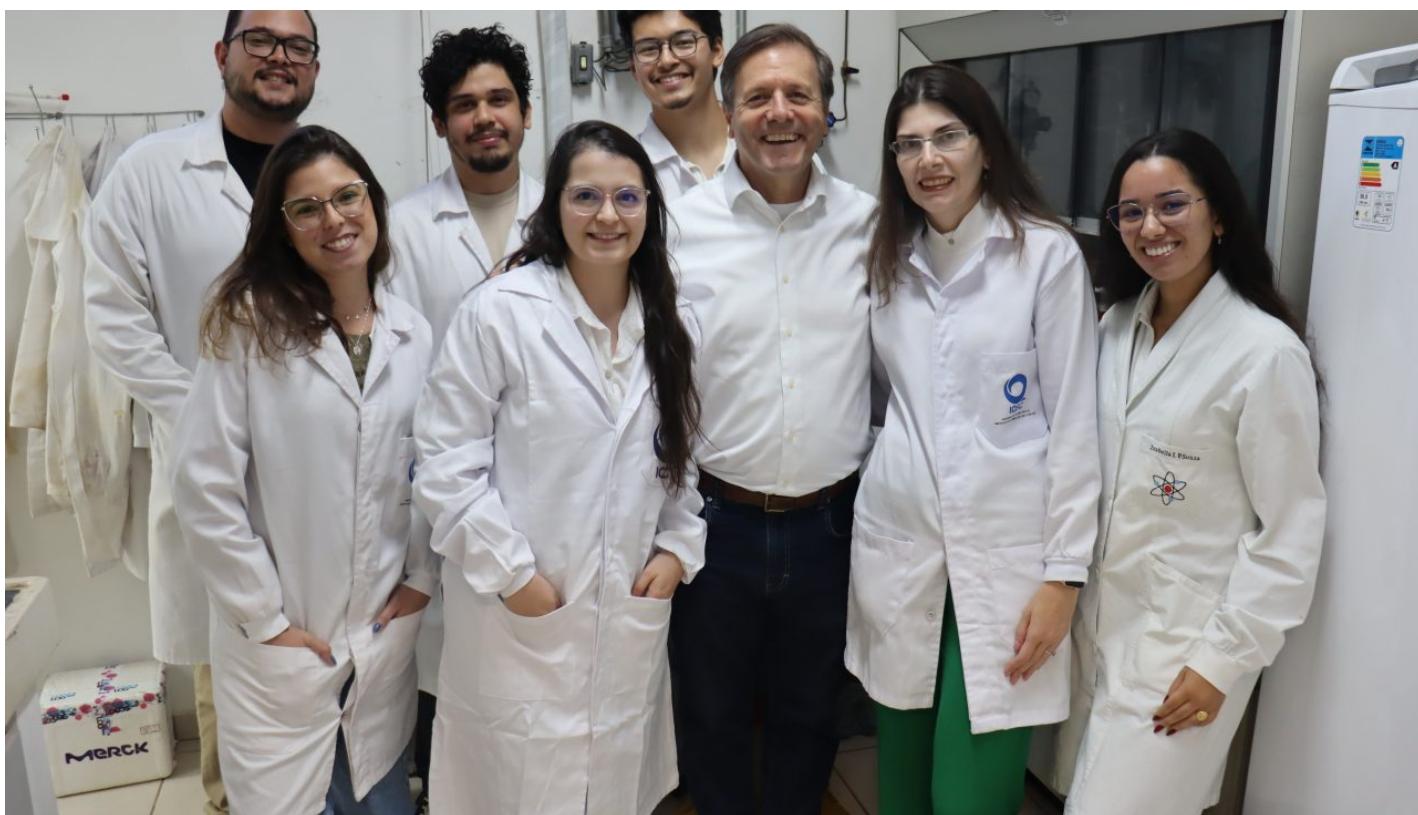


Foto: Henrique Fontes/IQSC

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 vírais.

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 relembrar 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.

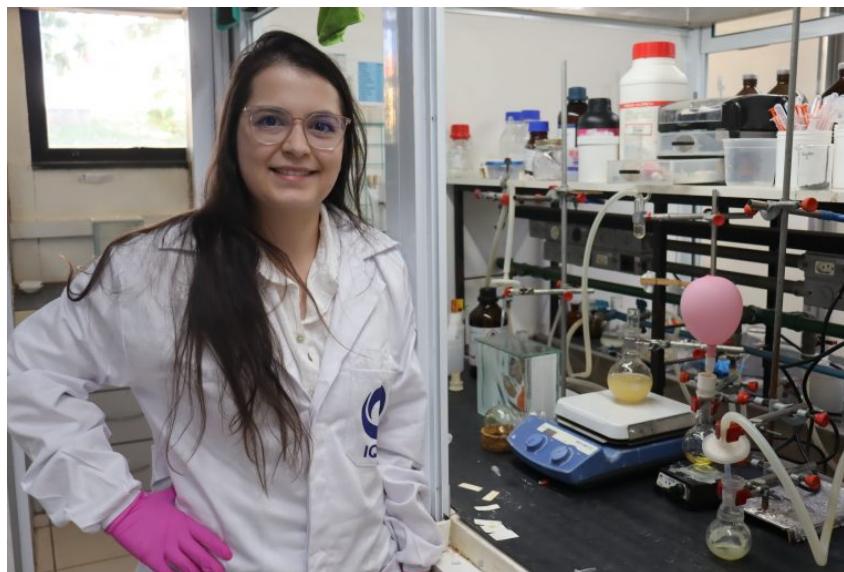


Foto: Henrique Fontes/IQSC

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.

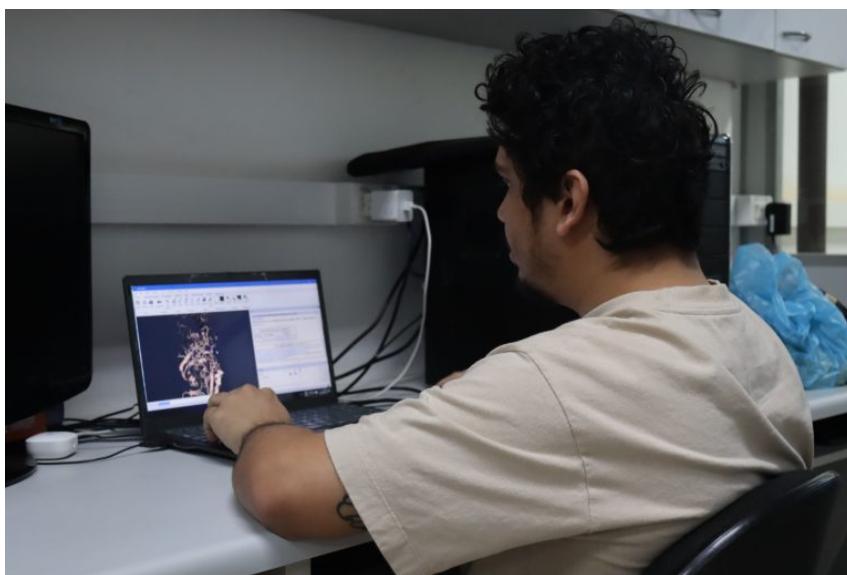


Foto: Henrique Fontes/IQSC

A trajetória de **Izabella Inocêncio 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*