

# Modelagem Molecular no Brasil

De 12 a 14 de março de 2010 nas instalações do Hotel Quality Niterói em Camboinhas, ocorreu o III Workshop de Modelagem Molecular realizado pela Escola de Química da UFRJ e pelo Instituto de Química da UFF, sendo organizado pela Associação Brasileira de Química. A coordenação do Workshop foi do Prof. José Walkimar de Mesquita Carneiro e o Coordenador Geral do Projeto é o Prof. Peter Rudolf Seidl.

A RQI esteve no evento e aproveitando a oportunidade de encontrar juntos vários professores com pesquisa e trabalhos publicados na área, além de alunos de mestrado e doutorado, pode conversar com alguns, assim como realizou com dois professores e um aluno, entrevistas sobre o momento que vive a Modelagem Molecular no Brasil.



Celso Fernandes

Parte da assistência do workshop

O Prof. Claudio Mota do IQ-UFRJ foi um dos palestrantes. Perguntado sobre o que achou do evento, ele disse: *“o III Workshop de Modelagem Molecular foi uma excelente oportunidade para ouvir grandes especialistas brasileiros na área, e discutir os avanços mais*

*recentes”*. E acrescentou *“Há de se destacar as aplicações de simulação para efeito de solvente em reações de formação de biodiesel e produção de fármacos. Outro tópico que mereceu destaque foi a modelagem de materiais, área em que a técnica tem avançado*

*significativamente nos últimos anos, permitindo o entendimento da catálise e dos processos de adsorção em nível molecular”.*

Outro professor presente foi Willian Ricardo Rocha da UFMG. Disse ele: *“O workshop foi muito importante para ver a qualidade dos trabalhos que vem sendo desenvolvidos nessa área no estado do Rio de Janeiro. Vários trabalhos de muita qualidade e de grande relevância científica vem sendo desenvolvidos e foram apresentados. A formatação do workshop foi muito bem definida, permitindo a interação entre os alunos e pesquisadores e, por conseguinte, possibilitando o estabelecimento de novas colaborações científicas entre grupos de diferentes regiões do país. Desta forma eu considero que o III Workshop de Modelagem Molecular foi um sucesso e, aproveito a oportunidade para parabenizar e agradecer os organizadores (Prof. Peter Seidl e Prof. Walkimar Carneiro) pela excelente iniciativa”.*

Entrevistamos José Walkimar de Mesquita Carneiro do IQ-UFF e Marcos Serrou do Amaral da UFMS. Ambos, falam de suas experiências e traçam alguns caminhos para o futuro.

Vejam suas idéias a seguir.

**RQI** – O que o fez ingressar na área de modelagem molecular e por quê?

**Walkimar** – *“O motivo que me levou a trabalhar com Modelagem Molecular / Química Computacional pode ser atribuído a um misto de aptidão natural e desígnios do destino. Eu sempre gostei de matemática. Até hoje é minha paixão (científica) número 1. Tendo ingressado em um curso de Química*

**Claudio Mota**  
em sua fala



Celso Fernandes

*(não fiz matemática porque não queria ser professor) foi natural que procurasse, dentro da química, a área mais afeita à matemática, ou que exigisse um pouquinho mais de conhecimentos matemáticos, no caso a físico-química. Além disto, após conhecer um pouquinho sobre ciências e a pesquisa científica percebi que deveria seguir carreira fazendo ciências básicas. Foi isto que me levou a fazer pós-graduação em Físico-Química. Inicialmente eu pensava em trabalhar com espectroscopia e é aí que entra a contribuição do destino. Quando cheguei no IME em 1984 para iniciar o mestrado, o meu orientador de pós-graduação, Prof. Peter Seidl, estava iniciando trabalhos na área de modelagem molecular. Inclusive dispunha de uma cópia do programa MM2 (mecânica molecular) que havia sido obtida com o Prof. J. Bernassau. O programa precisava ser instalado em um computador Burroughs, então disponível no*

*IME, o que implicava compilação, depuração, avaliação de funcionalidade etc. Isto obviamente me tomou um bom tempo (ou tempo bom, dependendo do ponto de vista) mas também me fez aprender muito sobre mecânica molecular e sobre modelagem molecular como um todo. O resultado disto foi minha dissertação de mestrado, apresentada em fevereiro de 1996, e minha capitulação para a área de Modelagem Molecular / Química Computacional.”*

**Marcos** - *“Ingressei na área considerando a variedade de aplicações (computacionais) e a utilização de recursos computacionais nas pesquisas. Antes de ingressar no doutorado, por vontade própria, tive que escolher alguma área que tivesse utilização de computadores, desenvolvimento e utilização de pacotes computacionais. Este foi meu critério número zero”.*

**RQI** - *A modelagem molecular tem nos dias atuais a visibilidade que deveria ter no*

*âmbito da pesquisa?*

**Marcos** - *“Acredito que esteja melhorando. Isso se deve, provavelmente, a exigência cada vez maior de interpretações teóricas embasadas pela Modelagem Molecular de resultados experimentais.”*

**Walkimar** - *“Totalmente. Hoje a Modelagem Molecular/Química Computacional é uma técnica facilmente acessível, capaz de fornecer informações fundamentais sobre os mais variados problemas relacionados à estrutura das moléculas e indispensável em várias situações. Em minha opinião a Modelagem Molecular / Química Computacional deve ser vista como uma técnica que está à disposição dos químicos e físicos que tem a mesma relevância que as técnicas experimentais mais comuns. As metodologias experimentais aplicadas ao estudo de propriedades moleculares se beneficiam fortemente das técnicas de simulação e vice-versa. Uma é complementar à outra. As duas se somam*



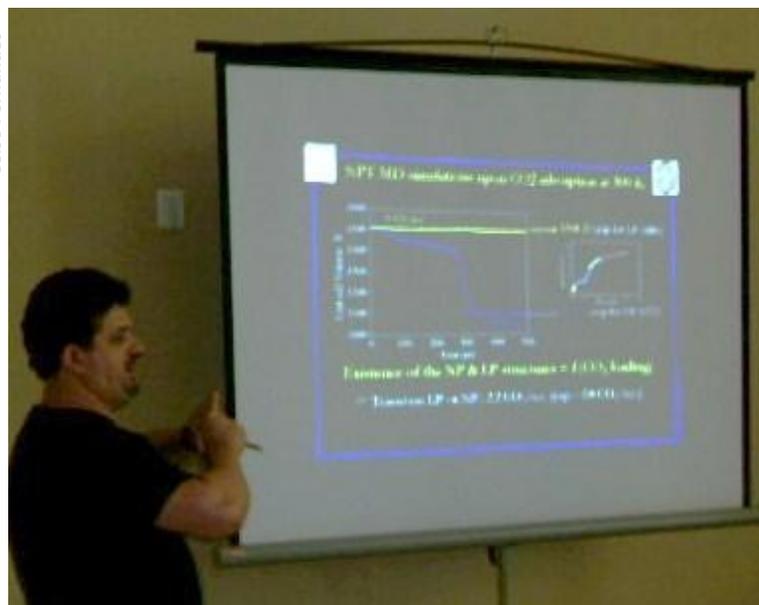
**Da esquerda para a direita no primeiro plano: Leonardo Costa, Willian Rocha e Walkimar Carneiro  
Na mesa de trás: Rosana Amorim e Alexandre Carauta**

para colocar à disposição dos químicos e físicos instrumental cada vez mais refinado para suas pesquisas. É importante destacar, ao contrário do que pensam muitos leigos, que Modelagem Molecular / Química Computacional não tem por fim a substituição de experimentos. Isto jamais acontecerá. O que se quer é ter instrumentos mais avançados (experimentais e teóricos) para o conhecimento cada vez mais apurado de estrutura e propriedades moleculares.”

**RQI** – Qual a estrutura que o senhor dispõe em sua Instituição para o melhor desenvolvimento dos trabalhos? O que pode ser melhorado?

**Walkimar** – “Hoje dispomos de uma estrutura razoável, com boa capacidade de cálculo e softwares modernos. Mas na área que trabalhamos existe um novelo sem fim. Quanto melhor for a infra-estrutura computacional de que dispomos maiores são os sistemas que queremos estudar e conseqüentemente maior deve ser a disponibilidade de recursos computacionais, e assim segue. Nunca temos, nem teremos a estrutura ideal. Por outro lado, julgo que este não é o problema principal (atualmente). Hoje o grande gargalo está na disponibilidade de pessoal, tanto de pessoal de pós-graduação quanto de pessoal técnico. Os valores cobrados, por exemplo, para montagem de uma pequena rede, pelo menos aqui no Rio de Janeiro, são completamente fora daquilo que se pode considerar razoável. Em nosso laboratório decidimos fazer disto também um processo de melhoria da capacidade de nossos alunos, mas pagamos por isto uma maior

Celso Fernandes



**Nilton Rosenbach faz sua apresentação**

*morosidade na produção de trabalhos científicos.”*

**Marcos** – “Dispomos de cluster computacional com 5 nós (8 núcleos por nó). Não é muito, mas já nos permite estudar muitos sistemas químicos solvatados. Dispomos de vários softwares (alguns de livre acesso outros proprietários). Se me dessem a opção de escolher entre: 1º) aumentar o cluster com novas máquinas/softwares ou 2º) contratar outro pesquisador para o laboratório. Certamente, optaria pela opção 2. De qualquer forma, acredito que em dois anos teremos opção de contratação.”

**RQI** – Como o desenvolvimento da modelagem molecular no Brasil está em relação a outros países?

**Marcos** – “No Brasil, os trabalhos são focados para aplicações utilizando pacotes computacionais desenvolvidos em outros países. Nesse aspecto, acredito que o Brasil está avançando e realizada pesquisa de altíssimo nível. Contudo, para

*desenvolvimento de softwares, o Brasil tem poucos grupos de pesquisa que investem nisso. Talvez, isso esteja diretamente relacionado à cobrança por publicações científicas.”*

**Walkimar** – *“Eu diria que no mesmo nível das demais áreas do conhecimento. Existem alguns centros de excelência, outros ainda em estágio inicial, e uma expansão muito forte. Atualmente os encontros do SBQT (Simpósio Brasileiro de Química Teórica) reúnem centenas de pesquisadores, nem sempre com idéias inovadoras, mas com uma massificação que se faz necessária para que se possa produzir aqui e ali trabalhos de excelência e grupos de pesquisa fazendo ciência de alto nível.”*

**RQI** – Qual sua expectativa para o futuro próximo em relação ao tema.

**Marcos** – *“Como mencionei, acredito na demanda cada vez maior por pesquisas utilizando a modelagem molecular. Também, conseguimos acompanhar o crescimento, em termos de números de átomos, dos sistemas estudados por modelagem molecular, além das representações teóricas mais “realistas” desses sistemas, tal como utilização de modelos de mecânica quântica levando em conta efeitos de solvente.”*

**Walkimar** – *“Nos aspectos gerais colocaria no mesmo nível do que respondi acima. Espero que a área continue o processo de expansão que se tem observado nos últimos anos até que se possa atingir uma situação de estado estacionário. Alguns grupos liderados por jovens pesquisadores que encontraram posição recentemente irão se consolidar. Os já consolidados continuarão sua tarefa de*

*formação de pessoal especializado. Especificamente com relação ao meu laboratório espero poder aumentar a disponibilidade de espaço físico, hoje um limitador importante de nossos trabalhos, consolidar colaborações, expandir linhas de pesquisa e captar pessoal que queira se dedicar a fazer química sem química.”*

Além dos já citados estiveram no Workshop Nilton Rosenbach, Alexandre Carauta, Martha Araujo, Mauricio Macedo, Jackeline Coelho, Fabio Miranda, Rosana Amorim, Rafaela Nascimento, Jones Ferreira, Aline Sampaio, Fernanda Barbosa, além de alunos de mestrado da UFF.

O que pensa o aluno de doutorado Leonardo Moreira da Costa.

**RQI** – Após a conclusão de sua graduação em Farmácia Industrial, você optou por fazer mestrado e doutorado em Modelagem Molecular. Por quê?

**Leonardo** – *“Para ser sincero entrei no mestrado em 2007 na UFF para trabalhar na área de síntese a respeito de petróleo com o professor Gilberto Romeiro. Não tinha nada a ver com modelagem. No primeiro período me disseram que tinha uma matéria muito fácil, que todo mundo passava com notas altas, que era a modelagem molecular (o que vi ao final do período, que não era verdade). Então para aumentar meu coeficiente de rendimento puxei essa matéria, da qual nunca tinha ouvido falar antes. Lembro que desde as primeiras aulas tive muito interesse pelos cálculos computacionais. Uma coisa que me impressionava era poder calcular e resolver problemas de bancada laboratório no computador. Via que era um*



**Martha Araujo e Mauricio Macedo**

*tópico que me chamava muito à atenção. Meu interesse foi crescendo cada vez mais, ainda mais pelo contato com o professor Walkimar que demonstra muita alegria e dedicação no ensino da modelagem, e então passei a ser co-orientado em meu mestrado por ele. Aí mudei todo meu projeto de pesquisa e entrei definitivamente nessa área, fazendo o mestrado e agora o doutorado.”*

**RQI** - O que imagina ou espera que esteja fazendo em termos profissionais daqui a cinco anos?

**Leonardo** - *“Espero ser professor de alguma instituição pública que trabalhe com pesquisa. Pretendo dar continuidade ao trabalho de meu professor orientador no sentido de formar pessoas tanto no lado acadêmico quanto no pessoal. Lembro que quando cheguei ao mestrado achava que seriam dois anos de estudo somente para aumentar o salário quando passasse num concurso público. Nesse tempo no laboratório de química computacional da UFF vejo que ampliei meus horizontes. Já participei de congressos, simpósios, reuniões científicas e palestras. Tenho, hoje, uma grande*

*identidade com meus projetos de pesquisa e vontade de divulgá-los e discuti-los com a comunidade científica. Isso me mostra o quanto minha mentalidade mudou nesses anos e minha motivação cresceu com o que faço. Espero no futuro poder atuar nesse sentido: promover o crescimento de pessoas e mostrar uma grande dedicação e entusiasmo pelo trabalho com modelagem molecular.”*

**RQI** - O que você diria a um aluno hoje na graduação que comentasse sobre a área de Modelagem?

**Leonardo** - *“Diria que é um campo muito amplo de estudo, pois tentamos entender, objetivando a solução, possíveis problemas que ocorrem na bancada de laboratório ou guiar e orientar estudos experimentais. Isso nos faz interagir com químicos orgânicos, inorgânicos, biólogos, farmacêuticos entre outros profissionais da área biotecnológica. Temos, então, de entender não somente da área de química computacional, mas também de outras pesquisas (áreas), decorrentes de seu meio científico, e de como usar a ferramenta modelagem molecular para gerar informações construtivas. Pessoalmente acho isso um fato bastante motivador por mostrar a abrangência e a utilidade da química computacional. Diria que para se trabalhar com modelagem molecular tem-se de ter dedicação, responsabilidade, senso de organização e motivação principalmente, a parte teórica e prática desta área tem de ser vistas como um aprendizado contínuo, onde tempo e experiência são fatores importantes na formação de um profissional qualificado.*