

MEMORIAL

Carolina Horta Andrade

Apresentado para promoção de Classe D para a Classe E, Professor Titular, da carreira de magistério superior na área de Química Farmacêutica Medicinal da Faculdade de Farmácia, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Goiás.

Junho de 2026

DEDICATÓRIA

À minha família, alicerce de todos os meus passos. Aos meus pais, Silvio e Juliana, que me ensinaram o valor do estudo, do trabalho, da ética e da perseverança. Ao meu amado esposo, companheiro de tudo, Judson, pelo amor, apoio constante, paciência, calma e equilíbrio que tornam esta caminhada possível e mais leve. Aos meus filhos, Manuela e Gabriel, que hoje enchem nossa casa de alegria que e um dia, espero, encontrarão nestas páginas um pouco da motivação que me trouxe até aqui.

COMISSÃO ESPECIAL DE AVALIAÇÃO

MEMBROS TITULARES

Prof. Dr. Luciano Moraes Lião (UFG) - Presidente

Prof. Dr. Brenno Amaro Da Silveira Neto (Unb)

Profa. Dra. Elizabeth Igne Ferreira (USP)

Prof. Dr. Marcelo Santos Castilho (UFBA)

MEMBROS SUPLENTE

Prof. Dr. Adriano Defini Andricopulo (USP)

Prof. Dr. Eric Souza Gil (UFG)

03/07/2026

SUMÁRIO

FUNÇÃO ATUAL	9
TRAJETÓRIA CIENTÍFICA	10
Considerações preliminares	10
Graduação	11
Mestrado/Doutorado direto	12
Pós-doutorado e ingresso na UFG.....	15
A carreira do magistério superior na UFG.....	17
I. ENSINO	18
I.1. Graduação	19
I.2. Pós-graduação <i>stricto sensu</i>	21
II. PESQUISA	24
II.1. Criação do Laboratório LabMol	25
II.1.1. Histórico e trajetória do LabMol	26
II.2. Produção intelectual.....	36
II.2.1. Produção científica	36
II.2.2. Bolsista de Produtividade do CNPq	39
II.2.3. Produção técnica e tecnológica.....	40
II.3. Projetos de pesquisa	42
II.3.1. Projetos de pesquisa e inovação	42
II.3.1.1. Coordenação de projetos com financiamento	43
II.3.1.2. Participação em projetos de pesquisa	45
II.4. Atividade formadora	47
II.4.1. Iniciação científica	48
II.4.2. Mestrado.....	52
II.4.3. Doutorado.....	54
III. EXTENSÃO	61
III.1. Organização de eventos científicos	62
III.2. Palestrante em eventos científicos nacionais	63
III.3. Palestrante em eventos científicos internacionais	66
IV. ADMINISTRATIVA	71
V. QUALIFICAÇÃO, RECONHECIMENTOS E PREMIAÇÕES	74
VI. CONSIDERAÇÕES FINAIS	81

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Disciplinas ministradas nos Programas de Pós-Graduação da UFG (2010–2025)	22
Tabela 2 – Coordenação de projetos de pesquisa com financiamento	43
Tabela 3 – Participação em projetos de pesquisa que receberam apoio financeiro	45
Tabela 4 – Iniciações científicas sob orientação, ano e título do trabalho.....	48
Tabela 5 – Mestres sob orientação, PPG de titulação e produto da dissertação.....	52
Tabela 6 – Co-orientações de mestrado, PPG e produto da dissertação	53
Tabela 7 – Doutores sob orientação, Programa de Pós-Graduação e produto da tese	54
Tabela 8 – Supervisões de pós-doutorado concluídas.....	56
Tabela 9 – Palestras em eventos científicos nacionais (2010–2025).....	63
Tabela 10 – Palestras e missões internacionais (2010–2025).....	67

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Carga horária anual de ensino de graduação e de pós-graduação <i>stricto sensu</i> (2010–2025).....	20
Figura 2 – Carga horária semanal média de ensino de graduação e de pós-graduação <i>stricto sensu</i> (2010–2025).....	21
Figura 3 – Publicações do LabMol em colaboração internacional, por país.....	26
Figura 4 – Produção científica classificada no sistema Qualis CAPES, área da Farmácia (2010–2025)	38
Figura 5 – Destino atual dos egressos de mestrado e doutorado sob minha orientação.....	57

FUNÇÃO ATUAL

- Professora Classe D, Associada nível 4, na área de Química Farmacêutica Medicinal da Faculdade de Farmácia (FF), Universidade Federal de Goiás (UFG).
- Líder do Grupo de Pesquisa LabMol — Laboratório de Planejamento de Fármacos e Modelagem Molecular (www.labmol.com.br), Faculdade de Farmácia, UFG.
- Bolsista de Produtividade em Pesquisa do CNPq — Nível 1B.
- Pesquisadora principal do *Center for the Research and Advancement of Fragments and molecular Targets* (CRAFT), UFG-USP.
- Coordenadora de projetos no Centro de Excelência em Inteligência Artificial (CEIA), UFG.
- Coordenadora de projetos no Centro de Competências Embrapii em Tecnologias Imersivas (AKCIT), UFG.
- Pesquisadora Principal no Centro de Excelência em Saúde Única (CESU), UFG.
- Editora Sênior da revista ACS Omega (American Chemical Society), Qualis A1.

Para comprovação das atividades descritas neste Memorial são fornecidos:

Anexo I — Cópia dos Relatórios Anuais de Docência (RADOCS/SICAD), anos-base de 2010 a 2025, devidamente apreciados e aprovados pelo Conselho Diretor da Faculdade de Farmácia, UFG. Adicionalmente, para consulta, cópia do *Curriculum Lattes*.

Anexo II — Documentos adicionais comprobatórios de atividades não descritas nos RADOCS.

TRAJETÓRIA CIENTÍFICA

CONSIDERAÇÕES PRELIMINARES

Nasci em 01 de agosto de 1983, em Formosa, Goiás, cidade do nordeste do estado de Goiás, filha dos mineiros de Belo Horizonte Silvio Monteiro Andrade e Juliana Horta Andrade. Morei em Formosa até o início de 2001, quando me mudei para Goiânia para ingressar no curso de Farmácia da UFG.

A vocação científica tem raízes familiares profundas. Meu avô paterno, Moacyr Duval Andrade, foi Professor Catedrático da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG). Segundo relatos de meu pai e meus tios, pois infelizmente ele faleceu quando meu pai tinha 20 anos de idade, meu avô concluiu duas graduações pela tradicional Escola de Minas, da Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), formando-se como Químico Industrial na turma de 1924 e em Engenharia de Minas e Civil na turma de 1926, onde conquistou a Medalha de Ouro, prêmio honorífico concedido tradicionalmente ao melhor aluno (primeiro colocado geral) de sua turma na instituição. Depois, tornou-se Professor Catedrático e Diretor do Instituto de Eletrotécnica na Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG). Foi uma figura de destaque na engenharia e na infraestrutura de eletrificação e siderurgia no Brasil e no mundo, era fluente em sete idiomas.

Meus pais sempre prezaram pela nossa educação, ensinando-nos desde cedo que o conhecimento é o que nos aproxima do mundo. Trabalharam arduamente para que eu e minhas irmãs tivéssemos acesso às melhores escolas e aos melhores professores da cidade, um esforço silencioso que, tenho certeza, fez toda a diferença em minha trajetória. Foi com eles que aprendi que a excelência e a dedicação transcendem fronteiras geográficas e gerações.

Em 1987, iniciei meus estudos pré-primários e primários no Colégio São José, no centro de Formosa, onde cursei até a segunda série do primeiro grau. Em 1992, ingressei no Colégio Objetivo, onde cursei da terceira à oitava série. Em 1998, cursei o segundo grau científico no Colégio Visão, concluindo o ensino médio em Formosa no ano 2000. Ainda criança, fascinavam-me programas como *O Fantástico Mundo de Beakman* e *Castelo Rá-Tim-Bum*, que assistia com encanto, imaginando como seria fazer aquelas experiências de verdade. Adorava as feiras de ciências da escola e, já naqueles anos, meus projetos refletiam uma curiosidade pelos fenômenos naturais, sobretudo nas áreas de química e biologia, que viriam a ter papel decisivo na escolha da minha profissão.

Como costuma acontecer na adolescência, a escolha do caminho não foi imediata. Atraída pelas ciências biológicas, cheguei a prestar vestibular para Medicina na UFMG. A dúvida, porém, sempre voltava. Confesso que nunca me dei bem com a visão de sangue (passo mal e desmaio até hoje). Foi em longas

conversas com minha irmã mais velha, Simone, meu porto-seguro e inspiração de sempre, que descobri o curso de Farmácia. Sua cunhada, à época, era farmacêutica e a ela devo o incentivo definitivo: mostrou-me a amplitude da profissão e a diversidade de campos de atuação que ela abria. Encantei-me com a ideia e decidi seguir esse caminho. Aprovada no vestibular, ingressei no curso de Farmácia da Faculdade de Farmácia da UFG no primeiro semestre de 2001.

GRADUAÇÃO

Durante a graduação, realizei estágio no Laboratório de Controle de Qualidade de Alimentos (LCQA/FF-UFG), o que despertou em mim o interesse pela pesquisa científica. Em 2004, por sugestão da Msc. Farmacêutica Marcelita Portilho, coordenadora à época do LCQA, fui conversar com a Profa. Dra. Valéria de Oliveira, coordenadora do Laboratório de Bioconversão (LaBioCon), para realizar um estágio de iniciação científica. Iniciei meu estágio no LaBioCon em março de 2004, no momento em que também cursei a disciplina de Química Farmacêutica, ministrada pelas professoras Dra. Valéria de Oliveira e Dra. Clévia Ferreira Duarte Garrote. Foi ali que nasceu meu entusiasmo pela área que viria a definir toda a minha trajetória.

O estágio no LaBioCon, dedicado ao estudo do metabolismo do antirretroviral lamivudina por fungos filamentosos, resultou na minha primeira publicação em periódico indexado em 2005 e na participação em quatro eventos científicos. Foram os primeiros passos em direção ao mundo da pesquisa, que me abriu os horizontes para a pós-graduação.

Ainda assim, ao longo da graduação, eu não tinha clareza sobre o caminho a seguir; sabia apenas que não me via nas habilitações em Análises Clínicas (sangue!) ou Alimentos. Talvez a Indústria fosse uma alternativa. Esse cenário mudou em um único dia. Meu professor de Farmacotécnica, Prof. Dr. Edemilson Cardoso, convidou a mim e à minha melhor amiga da faculdade, Stephânia Fleury Taveira, para acompanhá-lo, de carro, a uma defesa de doutorado na FCFRP-USP, em Ribeirão Preto. Conversei com meus pais, e fomos com o Prof. Edemilson! Assistimos à defesa, conhecemos a USP e tive a oportunidade de conversar com uma possível orientadora, a Profa. Dra. Ivone Carvalho. Voltei a Goiânia com a certeza de que queria fazer mestrado e doutorado.

Concluí a graduação em Farmácia pela UFG em dezembro de 2004, consolidando uma base sólida em Química Farmacêutica (QF) que orientaria toda a minha trajetória acadêmica.

MESTRADO/DOCTORADO DIRETO

Conversando com meus pais sobre a possibilidade de cursar o mestrado em Ribeirão Preto, eles me perguntaram por que não buscaria um orientador na USP de São Paulo, visto que duas de minhas irmãs já moravam lá. Foi então que, por indicação da Profa. Valéria de Oliveira, agendei uma entrevista com a Profa. Dra. Elizabeth Igne Ferreira, coordenadora do Laboratório de Planejamento e Síntese de Quimioterápicos Potencialmente Ativos contra Endemias Tropicais (LAPEN) da Faculdade de Ciências Farmacêuticas da USP (FCF-USP) e uma das maiores referências da Química Farmacêutica brasileira. A Profa. Beth me recebeu com enorme cordialidade, e saí daquele encontro encantada, entusiasmada e decidida de onde iria passar os próximos anos da minha vida!

Em dezembro de 2004, realizei o processo seletivo do mestrado na USP. Para a minha surpresa, e também para a da Profa. Beth, fui reprovada no exame escrito, com uma nota próxima de zero. A decepção foi profunda: eu, que sempre havia sido a primeira aluna da minha turma de graduação na UFG, meus colegas utilizavam meu caderno para fazer cópias e estudar para as provas, não havia conseguido aprovação na seleção do mestrado da USP, justamente na área da minha escolha, a QF! Foi um momento que poderia ter me feito desistir do sonho, mas não foi o que aconteceu. A Profa. Beth foi a primeira a me incentivar a seguir adiante, com apoio igualmente firme dos meus pais e das minhas irmãs. Aquela reprovação, com o tempo, revelou-se o ponto de partida de uma das decisões mais importantes da minha vida.

Em janeiro de 2005, mudei-me para São Paulo, e fui morar com uma das minhas irmãs que vivia na cidade. Para ajudar a me sustentar, trabalhei como farmacêutica responsável na Rede Farmácias Pague Menos, de segunda a sábado, das 15h às 22h, dedicando as manhãs às atividades práticas no LAPEN e ao estudo para o novo processo seletivo. Foi um período de muita disciplina e dedicação, que se traduziu, alguns meses depois, na aprovação com louvor na seleção do PPG em Fármaco e Medicamentos da USP, em junho de 2005, ingressando no mestrado em agosto daquele ano, sob orientação da Profa. Elizabeth Igne Ferreira e coorientação da Dra. Kerly Fernanda Mesquita Pasqualoto.

Vivíamos, à época, um período de "vacas magras" no fomento à pesquisa e Pós-Graduação, e o Programa não dispunha de bolsas de mestrado naquele momento. Continuei, portanto, a trabalhar por mais um ano na drogaria, conciliando as disciplinas, as atividades de síntese no LAPEN e o turno na Pague Menos da Av. Berrini. Em dezembro de 2005, recebi o título de "Farmacêutica do Ano" das Farmácias Pague Menos em São Paulo, acompanhado de um convite para assumir a gerência de loja. Agradei, mas

declinei: tinha a clareza de que minha dedicação deveria ser integral ao mestrado.

Dado meu perfil, a maturidade científica que havia desenvolvido e a abrangência do meu projeto de doutorado, passível de ampliação, a Profa. Beth sugeriu que eu prestasse o exame de passagem direta de mestrado para doutorado. No dia 1º de agosto de 2006, dia do meu aniversário, fui avaliada e aprovada pela banca composta pelos Profs. Drs. Adriano Andricopulo (IFSC-USP), Carla Maria de Sousa Menezes e Carlota Rangel Yagui (FCF-USP). Obtive, então, logo a seguir, a bolsa de doutorado direto da FAPESP, um reconhecimento que me trouxe, em igual medida, responsabilidade e liberdade para perseguir a ciência em que acreditava.

Minha tese, intitulada "Planejamento racional de novos tuberculostáticos com base na estrutura das enzimas enoil redutase e timidina quinase do *M. tuberculosis*", centrou-se no planejamento, síntese e desenvolvimento de modelos de QSAR, incluindo QSAR-2D (HQSAR), QSAR-3D (CoMFA e CoMSIA) e QSAR-4D, e avaliação experimental para a descoberta de candidatos a fármacos contra a tuberculose, uma das doenças infecciosas mais letais do mundo, especialmente entre populações em situação de vulnerabilidade.

A Profa. Beth é, até hoje, uma das pessoas que mais me inspira. Sempre elegante e articulada, segura e generosa, ela continua sendo para mim um modelo de como liderar com serenidade e rigor científico. Devo a ela não apenas a oportunidade de ingressar na USP, mas a demonstração viva de que é possível ser uma mulher extraordinária na ciência, com clareza, força e humanidade. Ela é simplesmente incrível!

Em 2007, apoiada pela FAPESP, realizei um estágio de curta duração de trinta dias no laboratório do Prof. James Sacchettini, no *Department of Biochemistry & Biophysics* da *Texas A&M University*, que trabalhava com expressão, purificação e ensaios enzimáticos com enzima enoil redutase de *M. tuberculosis*, a InhA. A intenção era eu aprender as técnicas experimentais e firmarmos uma parceria para testarmos meus compostos sintetizados contra a enzima InhA.

No ano seguinte, em 2008, realizei um estágio de doutorado-sanduiche com bolsa CAPES PDSE em um laboratório de referência mundial: no grupo do Prof. Anton Hopfinger, na University of New Mexico (UNM), em Albuquerque, EUA, um dos criadores do QSAR-4D e inventor de vários fármacos de sucesso. Esses períodos foram decisivos: aprendi a pensar de forma verdadeiramente interdisciplinar, integrando química farmacêutica/medicinal e computacional, biologia estrutural e bioinformática, e consolidei as bases do que viria a ser a identidade científica do LabMol. Esse foi, sem dúvida, o passo mais importante e decisivo para o sucesso da minha carreira.

O Prof. Tony, como era carinhosamente conhecido, teve carreira ilustre. Antes da UNM, atuou na *University of Illinois at Chicago* (UIC), onde se tornou Professor Emérito de Química Medicinal e Farmacognosia, e foi Fundador, Diretor Técnico e Secretário do *The Chem21 Group*, empresa pioneira no desenvolvimento de metodologias computacionais para a indústria farmacêutica. Foi ele quem criou a metodologia 4D-QSAR, empregada por grupos de pesquisa em todo o mundo. Seu legado científico, encerrado com seu falecimento em 2018, incluiu contribuições para o desenvolvimento de moléculas como o Aspartame (adoçante artificial), o Donepezil (Aricept®, fármaco aprovado para o tratamento da doença de Alzheimer) e o Celecoxib (Celebrex®, anti-inflamatório inibidor seletivo da COX-2). Trabalhar ao seu lado foi uma imersão no que a química computacional é capaz de oferecer quando levada às suas últimas consequências.

Em uma carta de recomendação que escreveu para a CAPES quando voltei do doutorado-sanduíche, o Prof. Hopfinger registrou:

"Simplificando, Carolina é uma das melhores estudantes de pós-graduação (entre mais de 85) que estudaram comigo. Fico particularmente impressionado com sua determinação, criatividade e autossuficiência."

Prof. Anton Hopfinger, University of New Mexico, EUA, 2008.

A minha interação com o Prof Hopfinger rendeu a publicação de três artigos científicos em periódicos reconhecidos internacionalmente. Vale ressaltar que o Prof. Tony me colocou como autora correspondente dos artigos que publicamos. Ser colocada como autora correspondente por ele, um dos mais respeitados cientistas da área no mundo, foi, sem dúvidas, um *'game-changer'* para a minha carreira. Esse gesto de reconhecimento e confiança me abriu portas que eu nem sabia que existiam: logo após a defesa do doutorado, recebi convites para palestrar em congressos internacionais, tornando-me uma cientista profissional antes mesmo de ter meu primeiro cargo docente. Assim, logo após a minha defesa de doutorado em 2009, recebi convites para palestrar em dois congressos internacionais, um na África do Sul, organizado pela ICS-UNIDO, sendo o *"Workshop on Advanced Design and Development of Potential Drugs against Tuberculosis"*, e o outro na Malásia, sendo o *"Second National Seminar and Workshop on Computer-Aided Drug Design"*, organizado pelo *Malaysian Institute of Pharmaceuticals and Nutraceuticals* (MOSTI), de 8-11 de dezembro de 2009, em Penang, Malásia. Além disso, fui convidada para ser revisora de seis revistas científicas da área de modelagem molecular e química medicinal e recebi concessão de licenças acadêmicas de softwares de modelagem molecular.

Minha co-orientadora, Dra. Kerly Fernanda Mesquita Pasqualoto, foi igualmente fundamental para a minha formação. Sua dedicação era tal que,

quando o trabalho exigia mais tempo, ela abria as portas da própria casa para que eu continuasse meus experimentos computacionais lá. Levávamos meu computador de mesa até lá e trabalhávamos noite adentro na tese. Essa generosidade me ensinou que a ciência se faz também com humanidade, e que orientar é, acima de tudo, um ato de cuidado.

Defendi a tese em 03 de abril de 2009, obtendo o título de Doutora em Fármaco e Medicamentos pela USP.

PÓS-DOCTORADO E INGRESSO NA UFG

Um pouco antes da minha defesa de doutorado, em 2009, retornei a Goiânia para visitar os meus pais e procurei a Profa. Valéria de Oliveira buscando alguma oportunidade, que me apresentou à FAPEG, a recém-criada Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Goiás. A FAPEG, em parceria com o CNPq, estava com um edital aberto para fixação de jovens doutores, que tivessem se formado nos estados do Sul e Sudeste, para virem trabalhar no Centro-Oeste, Norte e Nordeste. Vi naquele edital uma perfeita oportunidade para voltar para o meu Estado, para ficar pertinho dos meus pais e de uma irmã que morava em Goiânia, com minha única sobrinha até o momento, a Bruna! Dada a minha área de atuação mais especializada, Química Medicinal Computacional, a Profa. Valéria me indicou a aplicar para esse edital com um supervisor com expertise mais próxima da minha área, me apresentando então o Prof. Dr. José Ricardo Sabino, do Instituto de Física da UFG, que trabalhava com simulações de dinâmica molecular. Assim, submetemos o projeto e fomos contemplados na Chamada FAPEG 08/2008, com o projeto intitulado “Planejamento, Identificação e Avaliação Bioquímica de Novos Agentes Antiparasitários: Inibidores da 14- α -Esterol Desmetilase (CYP-51)”, projeto este que fazia parte da Rede Goiana de Pesquisa em Modelagem Molecular e Difração De Raio X Aplicadas ao Planejamento e Desenvolvimento de Novos Fármacos. Assim, logo após defender o doutorado em abril de 2009, iniciei minhas atividades como pesquisadora bolsista de Desenvolvimento Científico Regional (DCR-CNPq) em maio do mesmo ano, dedicando-me ao planejamento de novos candidatos a fármacos antiparasitários. Naquele momento, juntamente com a bolsa do CNPq, a FAPEG fornecia um “enxoval” para o jovem pesquisador, no valor de R\$ 22.000,00 para a fixação desses jovens doutores no Estado de Goiás. Este foi o meu primeiro projeto de pesquisa aprovado, e o recurso foi utilizado para comprar os primeiros computadores, monitores e *no-breaks* e implementar o Laboratório de Planejamento de Fármacos e Modelagem Molecular da FF-UFG, o LabMol, ainda em 2009.

Logo no início do ano seguinte, em 2010, abriu o concurso para a área de Química Farmacêutica Medicinal na UFG. Prestei o concurso e fui aprovada

em primeiro lugar. Então, em 23 de julho de 2010, ingressei no quadro permanente de docentes da Faculdade de Farmácia da UFG como Professora Adjunta Nível I, lotada na área de Química Farmacêutica Medicinal. Naquele momento, ao assinar minha nomeação, assumi o compromisso de construir, na UFG, um laboratório de excelência capaz de competir internacionalmente e, ao mesmo tempo, de contribuir para o desenvolvimento da ciência e da saúde no Brasil.

A CARREIRA DO MAGISTÉRIO SUPERIOR NA UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS

Ao longo dos dezesseis anos de carreira na Faculdade de Farmácia da UFG, construí uma trajetória que integra, de forma indissociável, ensino, pesquisa, extensão e gestão acadêmica. A seguir, descrevo cada uma dessas dimensões, que juntas expressam minha contribuição ao magistério superior e à ciência brasileira.

I. ENSINO

I. ATIVIDADES DE ENSINO

I.1. GRADUAÇÃO

Desde meu ingresso na UFG em 2010, venho atuando sistematicamente no ensino de graduação no Curso de Farmácia da Faculdade de Farmácia, assumindo a responsabilidade pelas disciplinas centrais da área de Química Farmacêutica Medicinal. As principais disciplinas ministradas ao longo desses anos são:

FFA0126 — Introdução à Química Farmacêutica Medicinal (IQFM, 64h): disciplina semestral que aborda os fundamentos do planejamento de fármacos, propriedades físico-químicas, bases moleculares da ação de fármacos, estereoquímica de fármacos e processos de descoberta e planejamento de fármacos. Ministro esta disciplina desde 2010, em conjunto com mais um ou dois colegas, para turmas de 30 a 45 alunos, em aulas teóricas e práticas.

FFA0130 — Química Farmacêutica Medicinal (QFM, 64h): disciplina semestral avançada que aprofunda os conceitos das bases moleculares da ação dos fármacos, relação estrutura-atividade, contemplando diferentes classes terapêuticas. Ao longo dos anos, desenvolvi práticas laboratoriais inovadoras com uso de softwares de modelagem molecular. Ministro esta disciplina desde 2010, em conjunto com mais um ou dois colegas, para turmas de em média 30-45 alunos por semestre, em aulas teóricas e práticas.

QUI0231 - Química Orgânica II (96h), para o Curso de Farmácia (2010-2012): disciplina semestral que contempla os mecanismos de reação orgânica, estereoquímica e reatividade de grupos funcionais de relevância farmacêutica; disciplina essencial para a formação química dos futuros farmacêuticos e base para a compreensão de vias metabólicas de fármacos. Ministrei essa disciplina por cinco semestres consecutivos e em seguida, após aprovação de novo professor para a área na Faculdade de Farmácia, passei essa disciplina para o colega.

IPT0144 — Biotecnologia Aplicada à Parasitologia (96h), para o Curso de Biotecnologia: desde 2024 venho contribuindo com algumas aulas desta disciplina, onde abordo tópicos de bioinformática e planejamento de fármacos antiparasitários, em um semestre por ano.

Minha abordagem pedagógica sempre buscou romper as barreiras entre o ensino teórico e a prática científica contemporânea. Introduzi nas minhas aulas o uso de plataformas computacionais e ferramentas de quimioinformática, preparando os estudantes para os desafios do mercado farmacêutico e acadêmico do século XXI. Desenvolvi metodologias ativas, como resolução de problemas reais de planejamento de fármacos, que aproximam os alunos de questões de saúde pública relevantes, como doenças tropicais negligenciadas e resistência antimicrobiana. Atualmente, tenho utilizado o óculos de realidade virtual (VR) nas aulas práticas, para auxiliar os alunos a visualizarem as interações entre fármaco e receptor.

A participação nas disciplinas supracitadas resultou em cargas horárias de ensino de graduação que variaram entre 87 h/ano (em 2017) e 286 h/ano (em 2011), com média de 200,4 h/ano ao longo dos dezesseis anos de atuação na graduação, o que equivale a cerca de 6,4 horas/aula/semana na graduação. A **Figura 1** mostra a evolução da carga horária anual de ensino (graduação e pós-graduação) entre 2010 e 2025, e a **Figura 2** apresenta a correspondente carga horária semanal média. Considerando o conjunto da atividade de ensino (graduação + pós-graduação) ao longo destes dezesseis anos, a carga horária anual média foi de 279,2 h, resultando em carga horária semanal média de 11,7 h.

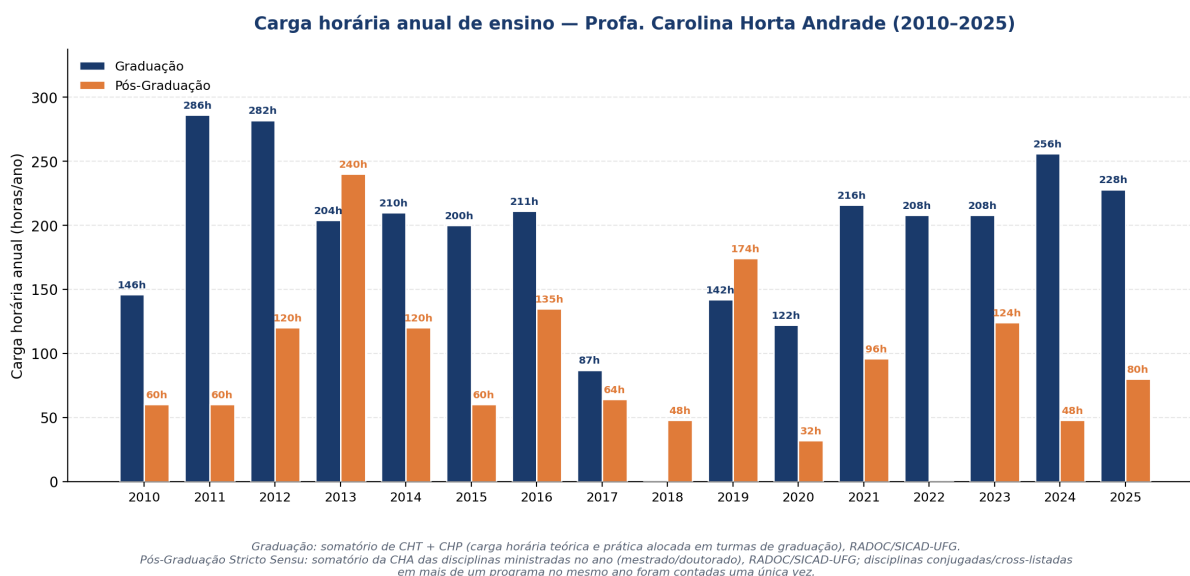


Figura 1 - Carga horária anual de ensino de graduação e de pós-graduação *stricto sensu* no período de 2010 a 2025 (RADO/SICAD-UFV).

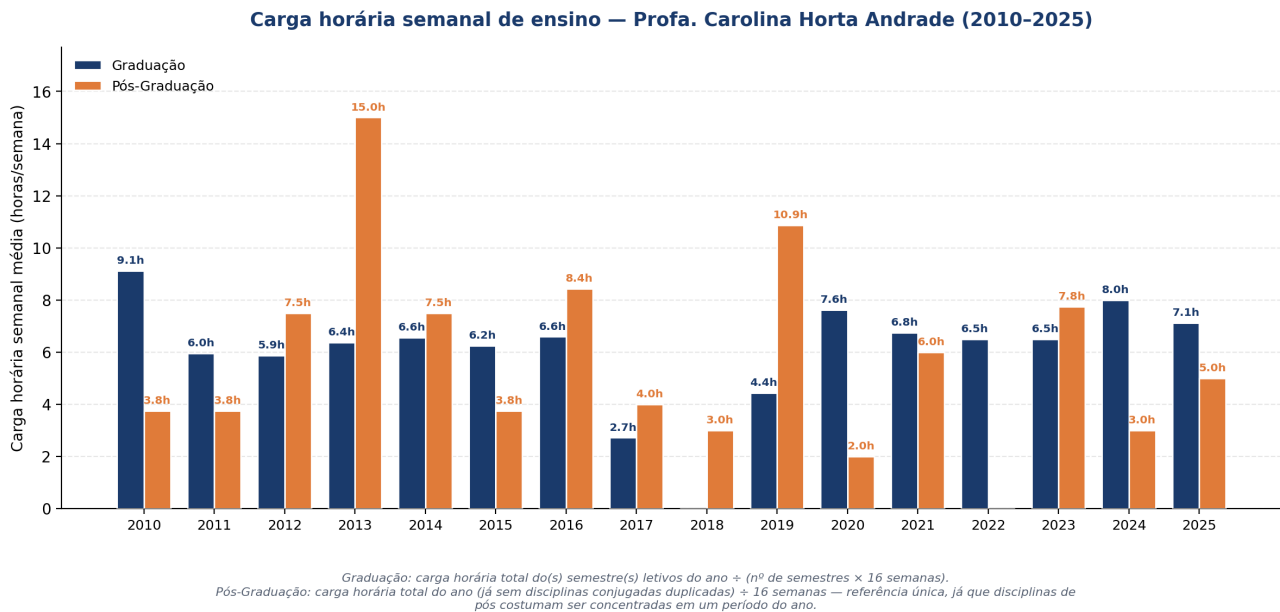


Figura 2 - Carga horária semanal média de ensino de graduação e de pós-graduação *stricto sensu* no período de 2010 a 2025 (RADOCSICAD-UFG).

Cabe destacar que nos períodos entre março de 2017 e 2018 a carga horária foi reduzida devido ao meu afastamento para licença capacitação seguido de afastamento para pós-doutorado na UNICAMP, totalizando 12 meses. E a partir de agosto de 2018 fiquei afastada por seis meses devido à minha primeira licença maternidade. Já em fevereiro de 2021 tive um novo afastamento por mais seis meses devido à minha segunda licença maternidade, o que refletiu nas cargas horárias reduzidas destes anos.

I.2. PÓS-GRADUAÇÃO STRICTO SENSU

A partir de outubro 2010, fui credenciada na Pós-Graduação, inicialmente no Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas (PPGCF) da Faculdade de Farmácia da UFG, que à época oferecia somente o curso de mestrado (conceito CAPES 3). Com o amadurecimento do meu grupo de pesquisa e a ampliação das parcerias interinstitucionais, obtive também credenciamento no Programa de Pós-Graduação em Medicina Tropical e Saúde Pública (IPTSP-UFG), programa que oferta tanto mestrado quanto doutorado (conceito CAPES 4, na época), o que me permitiu orientar pesquisas na interface entre a quimioinformática e as doenças infecciosas e parasitárias. Em 2013, com a criação do Programa de Pós-Graduação em Inovação Farmacêutica (PPGIF), sendo este o primeiro doutorado em Ciências Farmacêuticas das regiões Centro-Oeste e Norte do país, coordenado pela UFG em rede com a UFPA, a UFAM e a UNIFAP, obtive o credenciamento e passei a atuar também nesse programa, contribuindo para a formação de

pesquisadores em regiões historicamente sub-representadas na pós-graduação farmacêutica nacional. A atuação simultânea em três programas de pós-graduação distintos reflete a transversalidade das linhas de pesquisa do LabMol e meu compromisso com a formação de recursos humanos qualificados em diferentes contextos institucionais. A **Tabela 1** apresenta as disciplinas de pós-graduação que ministrei ao longo destes dezesseis anos.

Tabela 1 - Disciplinas ministradas nos Programas de Pós-Graduação (PPGs) da UFG no período de 2010 - 2025.

Disciplina	PPG	CH (h)	Anos Ofertados
Cheminformatics and Computer-Assisted Drug Design	PPGCF/PPGIF	48	2015, 2016, 2018, 2019, 2021, 2023
Modelagem Molecular	PPGCF	32	2011, 2012, 2013
Tópicos Especiais em Quimioinformática e Planejamento de Fármacos Auxiliado por Computador	PPGMTSP	48	2016, 2019, 2021, 2023
Metodologia de Pesquisa	PPGMTSP	32	2017, 2020
Data Science and Pharmacoinformatics	PPGCF	32	2017
Química Medicinal Avançada	PPGCF/ PPGIF	48	2014, 2025, 2016
Avaliação do Risco Ambiental de Agrotóxicos	PPGCF	32	2023, 2024
Avaliação (Eco)Toxicológica de Agroquímicos no Contexto de Saúde Única	PPGCF	32	2025
Atualizações e Colóquios de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas	PPGCF	32	2025
Seminários em Ciências Farmacêuticas II	PPGCF	48	2015, 2019, 2024
Seminários I	PPGCF	32	2016
Seminários II	PPGIF	48	2016

Dentre estas, gostaria de destacar três disciplinas que criei:

CFA0426 — *Cheminformatics and Computer-Assisted Drug Design* (48h, PPGCF-UFG e PPGIF): disciplina que criei quando aprovei o projeto de Pesquisador Visitante Especial (PVE) com a vinda do Prof. Eugene Muratov.

Desde 2015 a disciplina é ministrada em inglês, preparando os pós-graduandos para a literatura científica internacional e para o uso de ferramentas computacionais de ponta no desenvolvimento de fármacos.

MTSP0169 — Tópicos Especiais em Quimioinformática e Planejamento de Fármacos Auxiliado por Computador (48h, PPG Medicina Tropical e Saúde Pública-UFG): disciplina interinstitucional que amplia o alcance do ensino de quimioinformática para pós-graduandos de outras áreas da saúde.

Química Medicinal Avançada (48h, PPGCF-UFG e PPGIF-UFG): disciplina dedicada aos princípios avançados da química medicinal, com ênfase nas estratégias de identificação e otimização de candidatos a fármacos, relações estrutura-atividade e abordagens computacionais e experimentais integradas no planejamento racional de fármacos.

A oferta da disciplina '*Cheminformatics and Computer-Assisted Drug Design*' inteiramente em inglês, ofertada desde o ano de 2015, com a vinda do PVE Prof. Eugene Muratov, atraiu regularmente alunos e visitantes estrangeiros, consolidando o ambiente multilíngue do programa. Essa disciplina foi reconhecida pela CAPES como parte das ações de internacionalização do PPGCF, contribuindo para o aumento da nota do programa na última avaliação quadrienal para Conceito 5.

O conjunto destas disciplinas de pós-graduação representou uma carga horária média de 91,3 h/ano ao longo dos dezesseis anos (**Figuras 1 e 2**), concentrada principalmente nas disciplinas de *Cheminformatics and Computer-Assisted Drug Design*, Tópicos Especiais em Quimioinformática e Planejamento de Fármacos Auxiliado por Computador, Química Medicinal Avançada e Modelagem Molecular, as disciplinas que criei e que estão diretamente alinhadas às minhas linhas de pesquisa. As demais disciplinas, *Data Science and Pharmacoinformatics*, Avaliação do Risco Ambiental de Agrotóxicos, Avaliação (Eco)Toxicológica de Agroquímicos no Contexto de Saúde Única, Metodologia de Pesquisa, além de Seminários I e II e Atualizações e Colóquios ofertados no PPGCF e no PPGIF, completam minha contribuição à formação metodológica e à difusão científica dos discentes nos três programas de pós-graduação em que atuei.

II. PESQUISA

II. PESQUISA

II.1. CRIAÇÃO DO LABORATÓRIO DE PLANEJAMENTO DE FÁRMACOS E MODELAGEM MOLECULAR, O LABMOL



"Acima de tudo, não tema os momentos difíceis. O melhor vem deles."

Rita Levi-Montalcini, Nobel de Medicina, 1986.

Desde meu ingresso na UFG, meu principal projeto foi a criação e consolidação do LabMol, o Laboratório de Planejamento de Fármacos e Modelagem Molecular (www.labmol.com.br). O LabMol nasceu da convicção de que a quimioinformática e a inteligência artificial podem transformar radicalmente a velocidade e o custo da descoberta de novos fármacos, tornando viável o desenvolvimento de tratamentos para doenças que afetam dezenas de milhões de pessoas no mundo, mas que recebem pouquíssimo investimento da indústria farmacêutica por não serem economicamente atrativas, as chamadas doenças tropicais negligenciadas.

As linhas de pesquisa do LabMol organizam-se em dois grandes eixos complementares:

1. **Descoberta de candidatos a fármacos para doenças tropicais negligenciadas e viroses emergentes**, com foco em esquistossomose, malária, leishmaniose, doença de Chagas, tuberculose, dengue, Zika e COVID-19, por meio de estratégias integradas de triagem virtual, QSAR, modelagem por homologia, docking molecular, dinâmica molecular e validação experimental.
2. **Desenvolvimento de plataformas e ferramentas *in silico* preditivas para avaliação de toxicidade de compostos químicos**, como métodos alternativos ao uso de animais, abrangendo toxicidade aguda, cardiotoxicidade, sensibilização cutânea, mutagenicidade e desregulação endócrina.

Ao longo destes anos, o LabMol consolidou-se como um dos principais grupos de quimioinformática da América Latina, com colaborações em mais de 20 países, incluindo Estados Unidos, Reino Unido, França, Itália, Suécia, Alemanha, Portugal, Espanha, África do Sul e China.

A dimensão internacional desta produção encontra-se documentada de forma sistemática no relatório CAPES GLOBAL do PPGCF-UFG. Dos mais de 155 artigos publicados em periódicos indexados ao longo de 16 anos, aproximadamente 107 foram realizados em colaboração com grupos internacionais, o equivalente a aproximadamente 69% da produção total, envolvendo pesquisadores de mais de 20 países. As colaborações de maior volume são com grupos nos EUA (*University of North Carolina at Chapel Hill*, *National Institute of Environmental Health Sciences/NIH*, *Collaborations Pharmaceuticals Inc.*), no Reino Unido (*London School of Hygiene and Tropical Medicine*), em Portugal (*Universidade NOVA de Lisboa*), na Itália (*Università degli Studi di Torino e Università di Bologna*), na Suécia (*University of Gothenburg*), na Alemanha (*University of Bonn*), na África do Sul (*University of Cape Town*), na França (*Muséum National d'Histoire Naturelle*) e no México (*Universidad Nacional Autónoma de México*). A **Figura 3** sintetiza o perfil geográfico dessas colaborações.

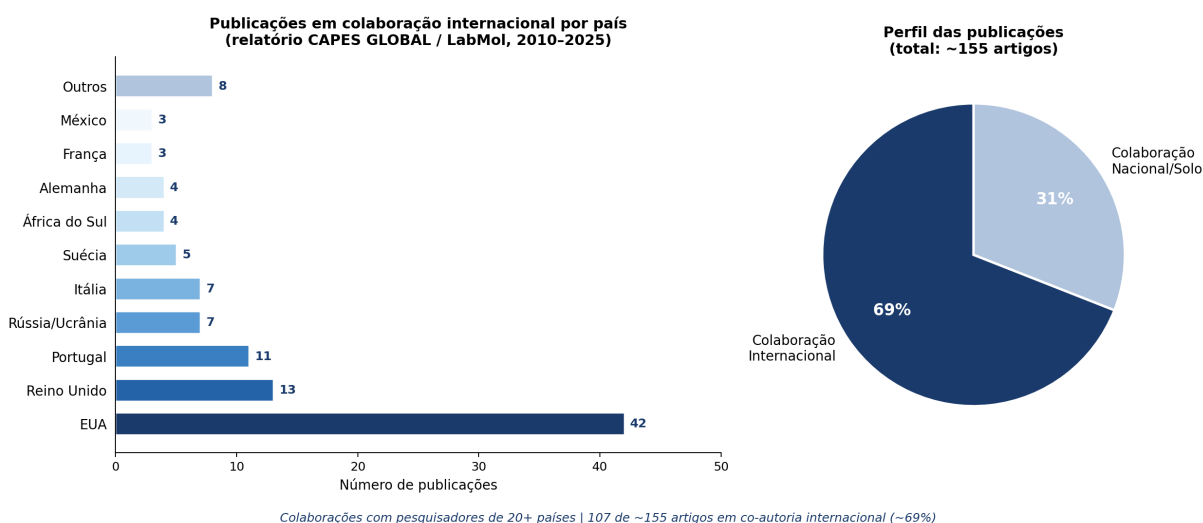


Figura 3 – Gráfico com as publicações do LabMol em colaboração internacional por país (Fonte: Lattes; ~155 artigos totais).

II.1.1. HISTÓRICO E TRAJETÓRIA DO LABMOL

O Laboratório de Planejamento de Fármacos e Modelagem Molecular — LabMol (www.labmol.com.br), nasceu, formalmente, em 2009, em uma sala de pouco menos de dez metros quadrados no 4º andar da antiga sede da Faculdade de Farmácia da UFG, que funcionava junto com a Faculdade de

Odontologia da UFG. Os primeiros computadores foram adquiridos com recursos do projeto DCR/FAPEG/CNPq, e o primeiro time, formado em sua grande maioria por estudantes de iniciação científica e de graduação, mas reunia pessoas movidas, sobretudo, pela curiosidade e pela motivação em fazer pesquisa de ponta em uma universidade do Centro-Oeste. Em 2010, após aprovação em concurso público para o cargo de Professora Adjunta na UFG, assumi oficialmente o compromisso de construir, na instituição que me formou, um grupo de pesquisa capaz de competir internacionalmente e, ao mesmo tempo, de contribuir para a saúde pública brasileira.

2010–2013: O princípio de tudo...

Os primeiros anos foram dedicados à estruturação das bases científicas e à captação de recursos. Em 2012, a aprovação em editais como o FAPEG/Universal, Universal CNPq e o CASADINHO/PROCAD abriu as portas para projetos de maior escala e para a consolidação das linhas de pesquisa em planejamento racional de fármacos antiparasitários e em modelos computacionais de toxicidade. Nesse mesmo ano, o LabMol recebeu o primeiro reconhecimento internacional de relevância: o prêmio *CINF Scholarship for Scientific Excellence*, concedido pela *Division of Chemical Information da American Chemical Society (ACS)*, prêmio que depois recebemos novamente em 2014 e 2019.

2014–2015: O reconhecimento internacional

O biênio 2014–2015 marcou a projeção do LabMol no cenário científico nacional e internacional. Em 2014, firmei uma parceria de cooperação com a *University of North Carolina at Chapel Hill (UNC)*, via Programa Ciência sem Fronteiras do CNPq, em colaboração com os Professores Alexander Tropsha e Eugene Muratov, referências mundiais em QSAR e quimioinformática. Naquele mesmo ano, recebi o “Prêmio Para Mulheres na Ciência” (L'Oréal/UNESCO/Academia Brasileira de Ciências), na categoria Ciências Químicas, primeiro reconhecimento nacional de grande visibilidade para o trabalho desenvolvido no LabMol. Em 2015, fui selecionada como *International Rising Talents* pela L'Oréal e UNESCO, em cerimônia em Paris, sendo reconhecida entre as quinze jovens cientistas mais promissoras do planeta. Esse reconhecimento impulsionou novas colaborações internacionais e consolidou o LabMol como referência emergente na Química Medicinal Computacional da América Latina.

2016–2019: Expansão, nova sede e liderança continental

Em 2015, durante o congresso da American Chemical Society (ACS) nos Estados Unidos, assisti a uma palestra do Dr. Sean Ekins, CEO da Collaborations Pharmaceuticals e profissional com longa trajetória em

grandes farmacêuticas, como Pfizer e Novartis, sobre reposicionamento de fármacos para o vírus Ebola. Ao final da apresentação, procurei-o para propor uma colaboração análoga voltada ao vírus da dengue, então em franca expansão no Brasil e ainda sem qualquer opção de tratamento antiviral aprovada. Esse breve diálogo seria o ponto de partida de uma das parcerias mais frutíferas da minha carreira.

Em 2016, o LabMol ganhou nova sede com a inauguração do prédio recém-construído da Faculdade de Farmácia da UFG. À época em que o projeto arquitetônico foi concebido, eu ainda não integrava o quadro docente e, por essa razão, não havia espaço de pesquisa previsto para o meu grupo. Após gestões internas, conseguimos pleitear uma sala originalmente destinada às aulas práticas de modelagem molecular, cerca de 40 m² que, por alguns anos, abrigaram simultaneamente as aulas e as atividades de pesquisa do LabMol. Naquele mesmo ano, fui diplomada Membro Afiliada da Academia Brasileira de Ciências (ABC), reconhecimento que coroou um ciclo de consolidação científica do grupo.

O período 2016–2019 foi marcado também pela expansão das linhas de pesquisa: além dos antiparasitários, o LabMol passou a investir fortemente em modelos de predição de toxicidade e em estratégias de reposicionamento de fármacos para viroses emergentes, trabalho que se tornaria essencial com o advento da pandemia de COVID-19.

Foi nesse contexto que, em março de 2016, no auge da emergência sanitária causada pela epidemia de Zika nas Américas, declarada *Emergência de Saúde Pública de Preocupação Internacional* pela Organização Mundial da Saúde, o Dr. Sean Ekins, juntamente com o Dr. Alexander Perryman, da *Rutgers University*, me procuraram retomando o diálogo iniciado em 2015. Nascia, ali, uma parceria que segue ativa até hoje, fundada nos princípios da ciência aberta para acelerar a descoberta de antivirais. Juntos, idealizamos e lançamos o OpenZika, projeto internacional dedicado à identificação de candidatos a fármacos contra o vírus Zika. Em parceria com o *IBM World Community Grid*, a *Rutgers University*, a *Collaborations Pharmaceuticals* e a Fundação Oswaldo Cruz (Fiocruz), o OpenZika mobilizou a capacidade computacional ociosa de milhões de computadores e dispositivos Android voluntariamente cedidos por cidadãos em mais de 80 países, permitindo a realização, em escala sem precedentes, de experimentos de *docking* molecular de dezenas de milhões de compostos contra estruturas cristalográficas e modelos por homologia de proteínas do ZIKV e de outros flavivírus relacionados.

Lançado oficialmente em 18 de maio de 2016, o OpenZika tornou-se uma das maiores iniciativas de descoberta computacional de fármacos já conduzidas no ambiente acadêmico mundial, com mais de 894 milhões de simulações submetidas apenas nos primeiros meses e todos os resultados disponibilizados publicamente, em tempo real, no portal do projeto. Os

fundamentos científicos, o desenho metodológico e os primeiros achados foram publicados em *PLOS Neglected Tropical Diseases* (Ekins, Perryman & Andrade, 2016) e tiveram ampla repercussão na imprensa internacional, com cobertura em veículos como *Forbes*, *CNBC* e *Nature Medicine*. Mais do que oferecer candidatos terapêuticos a uma virose emergente, o OpenZika inaugurou, para mim e para o LabMol, um novo modelo de pesquisa, colaborativa, aberta e cidadã, em que a ciência se faz com a participação da sociedade, projetando definitivamente o nosso grupo e a UFG no cenário global de resposta a emergências de saúde pública.

Em 2017, no auge desse ciclo de expansão, vivi um período singular pessoal e profissional de imersão científica que marcou profundamente minha trajetória: entre junho de 2017 e maio de 2018, atuei como pesquisadora visitante e pós-doutoranda no Instituto de Biologia da Universidade Estadual de Campinas (IB-UNICAMP), com bolsa FAPESP aprovada, no Departamento de Genética, Evolução, Microbiologia e Imunologia. O estágio foi precedido por uma licença-capacitação (maio a agosto de 2017, Processo UFG 23070-6644-2017-30) para treinamento em metodologias experimentais com *Plasmodium falciparum* e vírus Zika no Laboratório de Doenças Tropicais (LDT) do IB-UNICAMP, e sucedido pelo estágio pós-doutoral propriamente dito (agosto de 2017 a maio de 2018, Processo UFG 23070-6909-2017-8), totalizando aproximadamente doze meses de imersão integral em um dos mais importantes grupos de doenças tropicais do Brasil.

Essa imersão foi conduzida em estreita parceria com o Prof. Dr. Fabio Trindade Maranhão Costa (IB-UNICAMP), um dos mais reconhecidos especialistas em biologia do *Plasmodium* e em malária translacional no Brasil, e com a Profa. Dra. Elizabeth Bilsland, pesquisadora com expertise em biologia molecular de leveduras e em plataformas de triagem farmacológica aplicadas a patógenos. A colaboração integrou as ferramentas computacionais de quimioinformática e planejamento de fármacos do LabMol-UFG com a plataforma experimental de cultivo e ensaios funcionais de *P. falciparum* do grupo da UNICAMP, um modelo genuinamente translacional de parceria *in silico/in vitro* para a malária. Nesse mesmo período, consolidei colaboração tripartite com o Prof. Dr. Per Sunnerhagen, da University of Gothenburg (Suécia), especialista em biologia de leveduras e em mecanismos de resposta ao estresse celular, cujos modelos experimentais se mostraram altamente complementares às abordagens computacionais do LabMol para a identificação e validação de alvos antimaláricos.

Além da produção científica, o período foi marcado por intensa atividade de prospecção de financiamento internacional. Em colaboração com os Profs. Fabio Costa, Elizabeth Bilsland e Per Sunnerhagen, elaboramos e submetemos projetos a agências de fomento do exterior, incluindo o Swedish Research Council VR (Vetenskapsrådet, Suécia) e a Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT, Portugal), consolidando redes de cooperação que

perdurariam nos anos seguintes e que se materializariam, mais tarde, no Projeto CAPES-STINT com a University of Gothenburg, no projeto FAPESP-FCT, e no projeto FAPESP-Temático. A produtividade científica desse período expressou-se em publicações de alto impacto com o grupo da UNICAMP, entre as quais se destacam: “Deep Learning-driven research for drug discovery: tackling Malaria” (Neves, Braga, Alves, Nascimento, Cassiano, Muratov, Costa & Andrade, PLoS Computational Biology, 2020; doi: 10.1371/journal.pcbi.1007025) e “QSAR-Driven Design and Discovery of Novel Compounds with Antiplasmodial and Transmission Blocking Activity”(Lima, Melo-Filho, Cassiano, Neves, Alves, Braga, Cravo, Muratov, Calit, Bargieri, Costa & Andrade, Frontiers in Pharmacology, 2018; doi: 10.3389/fphar.2018.00146), além de trabalhos em co-autoria com o Prof. Sunnerhagen: “Computational Chemogenomics Drug Repositioning Strategy Enables the Discovery of Epirubicin as a New Repurposed Hit for Plasmodium falciparum and P. vivax” (Ferreira et al., Antimic. Agents & Chemot., 2020, doi: 10.1128/aac.02041-19) e “Violacein-Induced Chaperone System Collapse Underlies Multistage Antiplasmodial Activity” (Tavella et al., ACS Infectious Diseases, 2021, doi: 10.1021/acsinfecdis.0c00454). A experiência na UNICAMP fortaleceu de forma definitiva o perfil experimental-computacional do LabMol e pavimentou o caminho para os grandes projetos internacionais que viriam a seguir, como o COVID-AI BRICS (CNPq, 2021–2024).

Em 2018-2019, presidi a Comissão Organizadora do 9º *Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry* (BrazMedChem), o maior evento de Química Medicinal da América Latina, reunindo pesquisadores de todo o continente e fortalecendo o protagonismo da UFG nessa área.

2021: Era da Inteligência Artificial e integração ao CEIA

A partir de 2021, o LabMol passou por uma transformação profunda em sua identidade científica e institucional. A mudança para as instalações atuais, no 4º andar da Faculdade de Farmácia, pavimento destinado exclusivamente à pós-graduação e que passou a abrigar dois laboratórios de pesquisa anteriormente sem espaço no novo prédio, marcou um salto qualitativo na infraestrutura do grupo. Pela primeira vez, o LabMol passou a contar com cerca de 60 m² dedicados integralmente à pesquisa, incluindo sala própria para o *cluster* computacional e sala de reuniões.

Naquele mesmo ano, oficializou-se minha inserção no Centro de Excelência em Inteligência Artificial (CEIA/UFG), onde assumi a responsabilidade pelos projetos da área farmacêutica. Uma das primeiras iniciativas que conduzi nesse contexto foi a prospecção e o início de uma parceria estratégica com a Natura, voltada ao desenvolvimento de modelos de inteligência artificial e de uma plataforma preditiva para mutagenicidade. *Deep learning* e redes neurais profundas tornaram-se, então, ferramentas

centrais no fluxo de trabalho do laboratório, ampliando, de forma radical, nossa capacidade de triagem e otimização de candidatos a fármacos.

Desde 2021, tenho o privilégio de trabalhar e aprender com três líderes inspiradores: os Profs. Telma Soares, Anderson Soares e Arlindo Galvão Filho, respectivamente CEO e líderes do CEIA e do AKCIT, unidade EMBRAPPI e centro de competências EMBRAPPI vinculados ao Instituto de Informática da UFG. Com eles, aprendi lições inestimáveis sobre como traduzir resultados de pesquisa em soluções práticas para empresas, sobre a importância de agregar valor de negócio à produção científica e sobre a adoção de uma perspectiva mais empreendedora, complementar à acadêmica. É no diálogo com essas lideranças que venho aperfeiçoando a capacidade de engajar efetivamente com o setor produtivo e de comunicar, com mais clareza, o valor das ideias e inovações que produzimos. Essa experiência transformou de modo permanente minha visão sobre o papel do cientista na sociedade.

2022-2023: Breve histórico da minha entrada no CRAFT

Minha aproximação com o CRAFT (*Center for Research and Advancement on Fragments and Molecular Targets*) teve início em 2020, no contexto da elaboração do projeto multinacional submetido à Chamada BRICS STI Framework Programme (CNPq 441038/2020-4), que uniu nossos grupos em torno do desenvolvimento de terapêuticas para viroses emergentes. Esse projeto foi decisivo para integrar minha *expertise* em Inteligência Artificial aplicada à descoberta de fármacos, desenvolvida na UFG, à colaboração já consolidada entre os professores Maria Cristina Nonato e Flavio da Silva Emery na USP de Ribeirão Preto, que desde 2013 vinham trabalhando na caracterização estrutural e funcional da enzima diidro-orotato desidrogenase (DHODH) e na descoberta de inibidores em escala nanomolar.

O convite formal para integrar oficialmente o CRAFT veio em 2022, durante o *H3D Symposium*, realizado na África, quando o Prof. Flavio Emery me apresentou a visão de consolidar um centro de descoberta de fármacos híbrido entre a UFG e a USP. Para qualquer pesquisador da área de descoberta de fármacos, fazer parte do CRAFT é a realização de um sonho: um centro que cobre toda a cascata do desenvolvimento de um candidato a fármaco, da modelagem molecular e planejamento computacional, passando pela síntese orgânica de bibliotecas inovadoras de fragmentos baseadas em novos heterociclos e produtos naturais, até a avaliação biológica, bioquímica/biofísica e estrutural dos alvos moleculares, incluindo cristalografia de raios-X e triagem de fragmentos.

Minha entrada no CRAFT transformou o esforço bilateral USP-UFG em uma plataforma multicêntrica, articulando os três pilares do centro: biblioteca de fragmentos, biblioteca de alvos e modelos de IA/aprendizado de máquina, em um pipeline integrado e pioneiro no Brasil para a descoberta de fármacos

contra doenças endêmicas da América Latina e do Sul Global. Essa parceria materializa, para mim, o que há de mais virtuoso na ciência brasileira: colaboração interinstitucional, complementaridade de competências e compromisso com a saúde pública.

Em 2022, recebi o 5º Prêmio Mulheres Brasileiras na Química (ACS/SBQ), categoria Líder Emergente. Em 2023, organizamos o 1º Workshop CRAFT e participei, como conferencista, da Society of Toxicology (SOT), o maior congresso de toxicologia do mundo. Em 2023, recebi o prêmio *Early Career MedChemist Award*, concedido pela Divisão de Química Medicinal da Sociedade Brasileira de Química, durante o BrazMedChem, em Salvador.

2024–2026: Liderança global, tecnologias imersivas e criação do Centro de Excelência em Saúde Única (CESU) da UFG

Os anos recentes consolidaram o LabMol como um dos grupos de maior impacto internacional da Química Medicinal brasileira. Em 2024, recebi a condecoração “Cavaliere dell'Ordine della Stella d'Italia”, concedida pela Embaixada da Itália em reconhecimento às colaborações científicas Brasil-Itália, e fui listada pelo segundo ano consecutivo entre os Top 2% cientistas mais influentes do mundo (Stanford/Elsevier).

Naquele mesmo ano, o LabMol ampliou sua fronteira de atuação ao integrar o AKCIT, o Centro de Competências Embrapii em Tecnologias Imersivas Aplicadas a Mundos Virtuais, dando início ao projeto SOFIA (*Sensorial Olfactory Framework Immersive with AI*), que combina inteligência artificial, realidade virtual e olfação digital para aplicações terapêuticas e diagnósticas.

A olfação é uma sensação complexa que emerge da interação de pequenas moléculas químicas, os odorantes, com receptores olfativos. Essa interação intrincada está no coração do projeto SOFIA: buscamos entender como uma única molécula odorante pode interagir simultaneamente com múltiplos receptores, incluindo os receptores olfativos órfãos, aqueles que ainda não interagem com nenhum odorante conhecido. Nossa exploração combina IA e neurociência para estudar essas redes de interação complexas, com o objetivo de integrar os modelos computacionais em ambientes multissensoriais imersivos, usando dispositivos inovadores que geram estímulos direcionais precisos com neutralização rápida de odores. Esta área está na fronteira da ciência global, apenas um pequeno número de grupos no mundo explora essas interseções inovadoras entre IA, realidade virtual e olfação.

Ainda em 2024, integrei a equipe proponente do Centro de Excelência em Saúde Única (CESU), projeto submetido à FAPEG e coordenado pela Universidade Federal de Goiás, com a participação da UEG, do IFGoiano e da Embrapa. O CESU é uma iniciativa inédita e transdisciplinar dedicada ao

desenvolvimento de tecnologias para a promoção integrada da saúde humana, animal e ambiental, sob a ótica dos conceitos de *One Health* e da sustentabilidade, em alinhamento com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) da Agenda 2030 da ONU. A proposta reúne dez pesquisadores principais, a maioria bolsistas de produtividade do CNPq, das áreas de Agronomia, Ciências Biológicas, Ciências da Saúde, Farmácia, Química e Medicina Veterinária, organizados em nove eixos complementares de trabalho, com foco no uso racional de pesticidas, no desenvolvimento de novas tecnologias de controle de pragas e na avaliação de impactos sobre organismos não-alvo.

No CESU, o LabMol é responsável por uma das frentes mais estratégicas do centro: o eixo de Inteligência Artificial aplicada à triagem de moléculas e formulações. Essa abordagem permite avaliar grandes volumes de variáveis, moléculas, formulações e misturas de maneira racional, reduzindo significativamente tempo e custo no desenvolvimento de novos pesticidas, biopesticidas e formulações mais seguras e eficazes. A inclusão do LabMol no CESU traduz o reconhecimento da maturidade científica do grupo no emprego de métodos computacionais e de IA à descoberta e otimização de moléculas bioativas, consolidando sua atuação em uma rede multidisciplinar e multi-institucional voltada à inovação tecnológica, à formação de recursos humanos altamente qualificados e à transferência de tecnologia aos setores público e privado. Com a inauguração do CESU em 2026, o LabMol passa a integrar formalmente um dos primeiros centros de excelência em Saúde Única do país, contribuindo para colocar a UFG e o estado de Goiás em posição de referência nacional e internacional nessa temática.

Em 2025, fui agraciada com o Prêmio Goiano de Ciência, Tecnologia e Inovação (FAPEG) e participei, como única brasileira, da 3ª reunião do Grupo de Trabalho Temporário sobre Inteligência Artificial da OPCW (Organização para a Proibição de Armas Químicas), em Haia, contribuindo para os debates internacionais sobre o uso responsável da IA em contextos de segurança global. Ainda naquele ano, o LabMol recebeu premiação de melhor pôster no 13º Congresso Mundial de Alternativas e Uso de Animais nas Ciências da Vida (WC13), realizado pela primeira vez no Brasil, consolidando nossa liderança em toxicologia computacional e métodos alternativos.

Desde 2022, mantenho uma cooperação científica internacional com o Prof. Dr. Josef Spillner, líder do *Service Prototyping Lab* (SPLab) da *Zürcher Hochschule für Angewandte Wissenschaften* (ZHAW), Suíça, referência mundial em arquiteturas de software escaláveis, computação em nuvem sustentável e inteligência artificial aplicada a dados não estruturados. A parceria nasceu da concepção da iniciativa binacional Brasil-Suíça *SaferGreener Products*, coordenada pelo Dr. Barry Hardy, CEO da Edelweiss Connect Inc., empresa voltada ao desenvolvimento de plataformas digitais inteligentes para o *Safe and Sustainable by Design* (SSbD) de novos produtos

químicos e nanomateriais. Ao longo desses anos, a colaboração já se materializou em propostas conjuntas submetidas à Innosuisse e ao programa MSCA da União Europeia, em uma sessão científica que co-organizamos no 13º *World Congress on Alternatives and Animal Use in the Life Sciences* (WC13), realizado no Rio de Janeiro em 2025, e na coorientação de estudantes do curso de *Biological Risk Assessment* da ZHAW, que resultou no desenvolvimento de seis plataformas digitais para a avaliação de perigo de nanomateriais.

Em 2026, essa cooperação foi formalmente reconhecida com a aprovação do projeto "*Plataformas Digitais Inteligentes e Inteligência Artificial aplicadas à Segurança Química: Cooperação Internacional UFG-ZHAW*", contemplado na Chamada Pública FAPEG nº 39/2025 - Programa Pesquisador Visitante Estrangeiro, sob minha coordenação. O projeto viabilizará a vinda do Prof. Spillner ao Brasil em agosto de 2026, com agenda integrada ao LabMol, ao CEIA/UFG e ao AKCIT, no escopo do projeto SOFIA. Os trabalhos articularão o emprego de *Graph Neural Networks*, *Digital Twins* e arquiteturas sustentáveis de software ao desenvolvimento de modelos preditivos mais robustos no campo das Novas Abordagens Metodológicas, *New Approach Methodologies* (NAMs), com aplicação à segurança química, à toxicologia de nanomateriais e ao design sustentável de novos produtos. Mais do que reforçar um eixo estratégico de internacionalização do PPGCF/UFG, essa aprovação consolida uma nova fronteira de cooperação científica entre a Química Farmacêutica brasileira e a Computação Sustentável europeia, posicionando a UFG e o estado de Goiás na vanguarda do *Safe and Sustainable by Design* em escala internacional.

Em 2025, foi aprovada uma nova fase da nossa cooperação científica de longa data com o Prof. Dr. Per Sunnerhagen, do Department of Chemistry and Molecular Biology da University of Gothenburg (UGOT), Suécia, com o financiamento concedido pelo Swedish Research Council (SRC / Vetenskapsrådet) ao projeto "New Drug Targets Essential for Critical Life Cycle Stages of *Plasmodium vivax* Infection". Essa é a terceira aprovação consecutiva do nosso consórcio sueco-brasileiro pelo SRC, após os grants #2016-05627 (2017–2020) e #2021-03667 (2022–2024), consolidando quase uma década de cooperação ininterrupta com o grupo do Prof. Sunnerhagen, complementada, no período 2019–2024, pelo projeto STINT/CAPES entre UGOT, UFG e UNICAMP, que viabilizou intercâmbios de doutorandos e pós-doutorandos entre os três grupos. O consórcio reúne, além do LabMol, os Profs. Morten Grøtli (UGOT), Fabio T. M. Costa e Elizabeth Bilsland (UNICAMP), e a Fundação de Medicina Tropical Dr. Heitor Vieira Dourado (FMT, Manaus), com acesso exclusivo a amostras de pacientes da Amazônia brasileira, área endêmica de *Plasmodium vivax*. O novo projeto aplica abordagens integradas de genômica, quimioinformática assistida por inteligência artificial, química medicinal e genética substituta em leveduras para identificar e desenvolver inibidores seletivos de proteases parasitárias

críticas para a persistência do estágio hepático, a ativação dos hipnozoítos e a transmissão gametocitária do *P. vivax*. A contribuição do LabMol concentra-se no desenvolvimento de modelos de QSAR multiestágio capazes de prever a atividade de compostos contra múltiplos estágios do ciclo de vida do parasito, incluindo esquizontes hepáticos e gametócitos, linha em que o grupo já produziu, em coautoria com o Prof. Sunnerhagen, publicações em PLoS Computational Biology, ChemMedChem, Frontiers in Pharmacology, ACS Infectious Diseases e ACS Omega. Mais do que dar continuidade a uma das parcerias internacionais mais produtivas da minha trajetória, o projeto posiciona o LabMol no esforço global por uma cura radical da malária vivax, doença que afeta milhões de pessoas, sobretudo crianças e gestantes, em regiões tropicais negligenciadas, com forte presença na Amazônia brasileira.

Já em 2026, foi aprovada uma nova cooperação científica internacional do LabMol, agora com o Prof. Dr. Ivan Sasselli Ramos, do Centro de Física de Materiales (CFM-MPC), San Sebastián (País Basco, Espanha), instituição mantida pelo *Consejo Superior de Investigaciones Científicas* (CSIC) e pela *Universidad del País Vasco* (UPV/EHU). O projeto, intitulado "*Conformation-Driven Bioactivity Prediction of Epitope-Functionalized Nanofibers*", foi contemplado pelo programa GipuzkoaCoopera, da Diputación Foral de Gipuzkoa, com orçamento de €19.800 e período de execução previsto para setembro de 2026 a setembro de 2028. A parceria une, pela primeira vez no escopo do LabMol, a expertise consolidada em quimioinformática, QSAR e inteligência artificial à fronteira da química supramolecular de peptídeos, área em que o grupo do Prof. Sasselli é referência internacional, com produção em periódicos como *Cell Stem Cell*, *Science* e *Nature Communications*.

O projeto tem como objetivo desenvolver uma nova estrutura conceitual e computacional, denominada SPA-QSAR (*Supramolecular Peptide Assembly QSAR*), capaz de prever a bioatividade de nanofibras peptídicas funcionalizadas com epítomos, materiais multifuncionais de grande potencial em nanotecnologia e biomedicina. A abordagem articula simulações de dinâmica molecular (MD) e descritores quimioinformáticos clássicos a novos descritores supramoleculares, como mobilidade molecular interna, acessibilidade e topografia do epítomo, coesão do conjunto e densidade eletrostática, integrados por meio de modelos de aprendizado de máquina para prever a interação dessas nanoestruturas com proteínas-alvo de relevância terapêutica, com destaque para a proteína do envelope (E) de flavivírus como Zika e Dengue. Além do componente científico, o projeto inclui um eixo robusto de formação de recursos humanos altamente qualificados e de internacionalização da pós-graduação: estão previstas duas missões científicas minhas ao CFM-MPC (1 mês em cada ano) e estágios de pesquisa de dois mestrandos ou doutorandos do LabMol, totalizando até seis meses de imersão em uma das mais importantes instituições europeias dedicadas à física de materiais. Trata-se de uma cooperação inédita, que abre para o

LabMol uma nova fronteira temática: a bioatividade computacional de materiais supramoleculares; e amplia o leque de parcerias internacionais do grupo para incluir, agora, a Espanha entre os países com colaboração ativa e formalmente financiada.

Ainda em 2026, com a aprovação de novos projetos no Brasil e no exterior, foi possível adquirir três novas estações de trabalho de alto desempenho, denominadas, em homenagem a cientistas pioneiros, Rosalind, Turing e Jackson, equipadas com GPUs NVIDIA RTX 5090, o que posicionou o LabMol na elite da pesquisa em IA generativa e simulações computacionais de alto desempenho. No mesmo ano, um artigo do grupo estampou a capa da revista ChemMedChem. O laboratório conta hoje com 16 pesquisadores ativos, mais de 170 artigos publicados, índice H 41 (Google Scholar) e colaborações com mais de 20 grupos de pesquisa no Brasil e no exterior.

O que começou em uma sala de pouco mais de dez metros quadrados e uma equipe de poucos estudantes de graduação entusiasmados, tornou-se, em dezessete anos, um dos laboratórios de quimioinformática mais referenciados da América Latina. Mais do que os números, o que define o LabMol é o compromisso com ciência de alto impacto, com a formação de pesquisadores de excelência e com a convicção de que é possível fazer, mesmo fora do eixo Rio-São Paulo, ciência relevante para o mundo.

II.2. PRODUÇÃO INTELECTUAL

II. 2.1. Produção Científica

Minha produção científica reflete a consistência e o crescimento contínuo do LabMol ao longo de quinze anos. Até 2026, acumulei 179 artigos publicados em periódicos com rigorosa política editorial, 9 capítulos de livros e 2 patentes depositadas, além de 6 produtos tecnológicos (softwares) desenvolvidos e disponibilizados gratuitamente. Meu impacto bibliométrico é expresso por 4.952 citações no ISI Web of Science, com índice H de 37, e 8.044 citações no Google Scholar, com índice H de 43, métricas que posicionam o LabMol entre os grupos de maior impacto da Química Medicinal brasileira.

Entre as publicações com mais de 100 citações, destacam-se:

QSAR-based virtual screening: advances and applications in drug discovery. Frontiers in Pharmacology, 2018 — 597 citações.

Chalcone derivatives: promising starting points for drug design. Molecules, 2017 — 487 citações.

In silico Strategies to Support Fragment-to-Lead Optimization in Drug Discovery. Frontiers in Chemistry, 2020 — 296 citações.

Pred-hERG: A novel web-accessible computational tool for predicting cardiac toxicity. Molecular Informatics, 2015 — 289 citações.

A critical overview of computational approaches employed for COVID-19 drug discovery. Chemical Society Reviews, 2021 — 231 citações.

STopTox: an in silico alternative to animal testing for acute systemic and topical toxicity. Environmental Health Perspectives, 2022 — 226 citações.

CoMPARA: collaborative modeling project for androgen receptor activity. Environmental Health Perspectives, 2020 — 225 citações.

CATMoS: collaborative acute toxicity modeling suite. Environmental health perspectives, 2021 — 172 citações.

4D-QSAR: perspectives in drug design. Molecules, 2010 — 162 citações.

Alarms about structural alerts. Green Chemistry, 2016 — 154 citações.

Assessing the performance of 3D pharmacophore models in virtual screening: how good are they? Current topics in medicinal chemistry, 2013 — 149 citações.

QSAR-driven design, synthesis and discovery of potent chalcone derivatives with antitubercular activity. European Journal of Medicinal Chemistry, 2017 — 147 citações.

Tuning HERG out: antitarget QSAR models for drug development. Current Topics in Medicinal Chemistry, 2014 — 134 citações.

Predicting chemically-induced skin reactions. Part I: QSAR models of skin sensitization and their application to identify potentially hazardous compounds. Toxicology and applied pharmacology, 2015 — 125 citações.

Déjà vu: stimulating open drug discovery for SARS-CoV-2. Drug Discovery Today, 2020 — 118 citações.

Pred-skin: a fast and reliable web application to assess skin sensitization effect of chemicals. Journal of chemical information and modeling, 2017 — 106 citações.

Natural products as leads in schistosome drug discovery. Molecules, 2015 — 106 citações.

A análise da produção pelo sistema de Classificação Qualis CAPES (área da Farmácia) evidencia uma trajetória de qualificação contínua e acelerada ao longo de dezesseis anos (**Figura 4**).

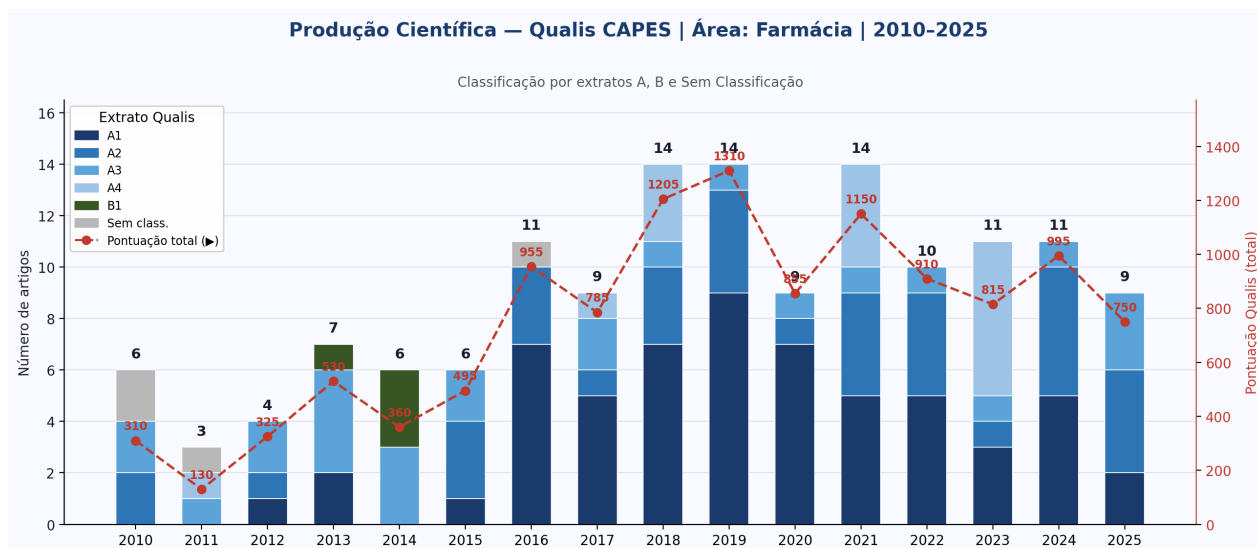


Figura 4 - Produção científica classificada no sistema de Classificação da CAPES Qualis, área da Farmácia, de 2010 a 2025.

Em 2019, atingi o maior volume de pontuação anual, 14 artigos e 1.310 pontos Qualis, com 9 publicações no extrato A1; os anos de 2018 e 2021 também se destacam, cada um com 14 artigos publicados, mas em média, entre 2016 a 2025, publiquei 11 artigos por ano. Mais revelador do que o volume, porém, é a evolução qualitativa: nos primeiros anos de consolidação do LabMol (2010–2011), a produção se concentrava nos extratos A2, A3 e periódicos ainda sem classificação Qualis; a partir de 2016, o extrato A1 passou a representar a maioria das publicações anuais. Esse deslocamento progressivo para os estratos superiores reflete a maturação das linhas de pesquisa do grupo, o aumento das colaborações internacionais e a consolidação do LabMol como referência global em quimioinformática e inteligência artificial aplicadas à descoberta de fármacos. Vale destacar que o desaparecimento do extrato B a partir de 2017 não representa redução da produção, mas sim a migração para a nova tabela Qualis (vigência 2021–2024), que redesignou os estratos B1–B5 como A3–A4 para periódicos do campo.

Cabe destacar ainda que, nos anos de 2023, 2024 e 2025, fui classificada entre os 2% de cientistas mais citados globalmente na área de Química Medicinal e Biomolecular, segundo o ranking da Universidade de Stanford em colaboração com a Elsevier. Este reconhecimento é o coroamento de uma trajetória de publicações consistentes, relevantes e amplamente utilizadas pela comunidade científica internacional.

II.2.2 Bolsista de Produtividade do CNPq

Logo após ter ingressado como docente na UFG, submeti proposta para o Edital de Bolsas de Produtividade do CNPq, para o Comitê da Farmácia, tendo o meu pedido inicial negado. Naquela época, o CA da Farmácia não tinha critérios claramente estabelecidos e fiquei frustrada com tal negativa. No ano seguinte, decidi submeter minha proposta para o CA de Química, que já tinha os critérios bem estabelecidos e divulgados desde aquela época. Então, em 2012, fui contemplada com a Bolsa de Produtividade em Pesquisa (PQ) do CNPq, nível 2, pelo Comitê de Química. A partir desse reconhecimento inicial, mantive a bolsa de forma ininterrupta até 2019, quando, após retornar da minha primeira licença-maternidade (2018), tive o auxílio prorrogado por um ano adicional. No entanto, acabei me desorganizando no período pós-licença maternidade e não me atentei que deveria ter solicitado nova bolsa em 2019. Fiquei um ano sem bolsa PQ.

Em 2020, apresentei nova solicitação para o CA da Química e fui novamente aprovada como bolsista PQ-2. No entanto, sempre me incomodou essa situação: sou Farmacêutica, atuo na Faculdade de Farmácia, e minha bolsa é pelo CA de Química, que não tem a sub-área de Química Medicinal ou Química Farmacêutica! Eu submetia o projeto pelas sub-áreas de Química Orgânica, ou Bio-inorgânica, ou Química Teórica, as quais não refletem exatamente a minha área de pesquisa. Mas, eu sempre tinha aquele medo de submeter novamente para o CA de Farmácia, depois daquela primeira negativa.

Em 2025 tive que solicitar novamente minha “renovação” de bolsa, e dessa vez, me empoderei e decidi finalmente concorrer no CA de Farmácia, na minha sub-área, Química Farmacêutica Medicinal. E agora, em 2026, tive a grata satisfação de uma nova conquista: a aprovação da bolsa pelo Comitê de Farmácia, e o melhor, com elevação ao nível 1B, reconhecimento que reflete a consolidação da minha atuação na interface entre Química Medicinal, Químioinformática e Inteligência Artificial aplicada à descoberta de fármacos.

II.2.3. Produção Técnica e Tecnológica

As atividades de pesquisa desenvolvidas na UFG, em cooperação com meus colegas e estudantes, resultaram não apenas em conhecimento científico, mas também em produtos tecnológicos de uso aberto. Ao longo deste período, foram realizados dois depósitos de pedidos de patente junto ao Instituto Nacional de Propriedade Industrial (INPI). Adicionalmente, desde 2013, o LabMol desenvolveu seis produtos tecnológicos, sendo estes

programas de computador e ferramentas computacionais disponibilizadas gratuitamente à comunidade científica mundial. Entre eles, destacam-se:

Pred-hERG: modelo preditivo de cardiotoxicidade por bloqueio do canal hERG (<https://predherg.labmol.com.br/>);

Pred-Skin: plataforma para predição do potencial de sensibilização cutânea (<https://predskin.labmol.com.br/>);

Cyto-SAFE: modelo preditivo de citotoxicidade (<https://cytosafe.labmol.com.br/>);

SStopTox (*Systemic and Topical chemical Toxicity*): plataforma de inteligência artificial para predição de toxicidade aguda sistêmica e local, como alternativa a ensaios em animais, que é mantido pela Universidade da Carolina do Norte (<https://stoptox.mml.unc.edu/>);

QSAR-Lit: ambiente de construção de modelos QSAR sem necessidade de programação (<https://qsarlit.streamlit.app/>);

OdorSight: modelos de IA para classificação de moléculas em odorantes e inodoras (<https://odorsight.labmol.com.br/>);

InsightAI (<http://insightai.labmol.com.br>): plataforma integradora que reúne, em interface única e acessível ao público, os múltiplos modelos preditivos desenvolvidos pelo grupo.

Essas ferramentas ganharam projeção internacional e foram reconhecidas com diversas premiações de prestígio. O Pred-Skin recebeu, em 2014, o *CINF Scholarship for Scientific Excellence*, concedido pela *Division of Chemical Information da American Chemical Society* (ACS). Em 2018, foi laureado com o *Lush Prize — Young Researcher Award*, que foi dado ao meu orientando, Vinícius de Medeiros Alves, uma das mais prestigiosas premiações mundiais dedicadas ao desenvolvimento de métodos alternativos ao uso de animais, concedida pela *Lush Cosmetics* (Reino Unido) em parceria com a *Ethical Consumer*. Naquela edição, apenas 17 projetos provenientes de nove países foram contemplados, e o Pred-Skin foi o único projeto brasileiro premiado. Em 2020, a tese de doutorado do Vinícius recebeu ainda o Prêmio CAPES/Natura Campus de Excelência em Pesquisa, com um prêmio no valor de R\$ 25.000, concedido pelo Ministério da Educação em parceria com a Natura, em reconhecimento ao Pred-Skin como plataforma computacional alternativa ao teste animal LLNA (*Local Lymph Node Assay*).

O SStopTox também recebeu importantes reconhecimentos internacionais. Em 2019, foi contemplado, igualmente, com o *CINF Scholarship for Scientific Excellence* da ACS, no trabalho da minha orientanda de doutorado Joyce V.V.B. Borba. Em 2023, ela foi laureada com o prestigioso prêmio "*Best Published Paper Advancing the Science of Risk Assessment*", concedido pela *Society of Toxicology* (SOT), uma das maiores sociedades científicas do mundo na área de toxicologia, em reconhecimento ao impacto

da plataforma como avanço metodológico na avaliação preditiva de risco químico e como alternativa robusta ao uso de animais em ensaios toxicológicos.

O Cyto-SAFE, por sua vez, foi reconhecido em 2024 com o 21º Prêmio Destaque na Iniciação Científica e Tecnológica do CNPq, para o meu orientando de iniciação científica Francisco Lucas Feitosa de Oliveira, uma das mais importantes lãureas nacionais voltadas à valorização de pesquisas conduzidas por estudantes em estágio inicial de formação, evidenciando o papel formador do LabMol e a maturidade científica de seus orientandos de iniciação científica no desenvolvimento de soluções computacionais inovadoras para toxicologia preditiva.

Mais recentemente, no âmbito do projeto SOFIA (*Sensorial Olfactory Framework Immersive with AI*) e da parceria do LabMol com o AKCIT, o Centro de Competências Embrapii em Tecnologias Imersivas, o nosso grupo desenvolveu o OdorSight, módulo integrado à plataforma InsightAI (<http://insightai.labmol.com.br>) dedicado à predição de propriedades olfativas baseada em redes neurais de grafos (*Graph Neural Networks*). Treinado sobre um conjunto curado de 4.212 compostos e dotado de um arcabouço de Inteligência Artificial Explicável (XAI), o Odor-Sight identifica visualmente as unidades osmofóricas mínimas que governam cada predição e quantifica, em tempo real, sua confiabilidade. O Odor-Sight representa uma das interseções mais inovadoras entre IA, neurociência e olfação digital, com aplicações em fragrâncias, cosméticos, alimentos e toxicologia computacional, área de fronteira explorada, em escala global, por um número muito restrito de grupos no mundo.

A trajetória dessas ferramentas evidencia o compromisso do LabMol com uma ciência aberta, reprodutível e socialmente útil, disponibilizada gratuitamente à comunidade científica internacional para apoiar a tomada de decisão científica, regulatória e industrial, e contribuir ativamente para a consolidação das novas abordagens metodológicas (NAMs, *New Approach Methodologies*) na avaliação de segurança de fármacos, cosméticos e produtos químicos.

II.3. PROJETOS DE PESQUISA

II.3. 1. Projetos de Pesquisa e Inovação

Os alicerces da produção científica do LabMol foram lançados logo após meu ingresso na UFG, em 2010, por meio de três projetos financiados pelo CNPq: (1) 'Planejamento de Novos Candidatos a Fármacos para Doenças Negligenciadas' (CNPq, 2009–2014); (2) 'Planejamento, Identificação e Avaliação Bioquímica de Novos Agentes Antiparasitários: Inibidores da 14α-

Esterol Desmetilase' (CNPq, 01/09/2009–31/07/2014), com foco em inibidores enzimáticos de tripanossomatídeos; e (3) 'Modelagem *in silico* do metabolismo e da toxicidade de compostos candidatos a fármacos' (CNPq, 01/02/2010–31/07/2014), que estabeleceu a base computacional para a predição de ADMET no grupo.

Ao longo da carreira, coordenei e participei de dezenas de projetos de pesquisa com financiamento de agências nacionais e internacionais. Destaco os mais relevantes:

OpenZika (2016–2020, IBM World Community Grid): Coordenei o projeto mundial OpenZika, em parceria com a IBM (através da sua iniciativa filantrópica, o World Community Grid) e pesquisadores do Brasil e Estados Unidos, que utilizou computação distribuída para triagem virtual de bilhões de moléculas contra alvos do vírus Zika. O projeto tornou-se referência global no uso de ciência aberta e computação colaborativa para resposta a emergências de saúde pública, com ampla cobertura da mídia nacional e internacional, incluindo Forbes, CNBC e Nature Medicine.

COVID-AI BRICS (2020–2024, CNPq/MCTI): “Plataforma Multidisciplinar e Multicêntrica baseada em Inteligência Artificial para COVID-19”. Coordenei este projeto multi-institucional que envolveu 3 países do BRICS e sete instituições de pesquisa no Brasil. O projeto envolveu toda a cascata do desenvolvimento de fármacos, integrando modelos computacionais e IA, triagem virtual, ensaios biológicos, síntese e otimização estrutural, ensaios farmacocinéticos e desenvolvimento de nanoformulação para liberação pulmonar, para identificar candidatos terapêuticos para a COVID-19, com resultados publicados em diversos periódicos de alto impacto e amplamente divulgados.

Plataforma brasileira *in silico/in vitro* como alternativa ao uso de animais para avaliação de segurança de produtos químicos (2022–2026, CNPq): Coordenei este projeto que visou desenvolver e validar modelos preditivos de toxicidade computacional, com enfoque especial em métodos que possam substituir ou reduzir o uso de animais em testes de segurança.

CRAFT — Center for the Research and Advancement of Fragments and molecular Targets (2022–atual): Centro interdisciplinar que integra biologia estrutural, síntese química, IA e triagem farmacológica para aceleração da descoberta de fármacos.

X-SOFIA: Plataforma Vestível de Olfacção Generativa por IA para Imersão Multissensorial Aumentada (2024–atual): Projeto inovador que integra realidade virtual, IA e olfacção digital para aplicações diversas, desenvolvido e financiado pelo AKCIT, o Centro de Competências Embrapii em Tecnologias Imersivas da UFG.

ADMET-AI — Avançando no desenvolvimento de terapias para viroses emergentes com IA (2025–atual, CNPq): Coordeno este projeto que

desenvolve modelos de IA para otimização multiparamétrica de candidatos a antivirais.

IA e Inovação Terapêutica contra Esquistossomose e Malária — Foco na DHODH (2025–atual, CNPq): Coordeno este projeto que aplica IA para a descoberta de inibidores da enzima diidroorotato desidrogenase de *Schistosoma mansoni* e *Plasmodium falciparum*.

SYNAPSE: SYstema Neuroadaptativo Assistido por Plataforma Sensorial (2026-atual): Projeto inovador que integra realidade virtual, IA e olfação digital para aplicações terapêuticas, desenvolvido e financiado pelo AKCIT, o Centro de Competências Embrapii em Tecnologias Imersivas da UFG.

II.3. 1. 1. Coordenação de Projetos de Pesquisa com Financiamento

A **Tabela 2** lista os projetos de pesquisa com financiamento que coordeno ou coordenei.

Tabela 2 - Coordenação de projetos de pesquisa com financiamento.

Projeto	Editais / Chamada	Período	Valor Aprovado
Plataformas Digitais Inteligentes e Inteligência Artificial aplicadas à Segurança Química: Cooperação Internacional UFG-ZHAW	FAPEG 09/2025 – Pesquisador Visitante	2026–atual	R\$ 20.000,00
Conformation-Driven Bioactivity Prediction of Epitope-Functionalized Nanofibers	GipuzkoaCoopera, Espanha (CFM–MPC, San Sebastián)	2026–atual	EU 19.800,00
ADMET-AI: Avançando no desenvolvimento de terapias inovadoras para viroses emergentes com IA e otimização multi-paramétrica	CNPq/MCTI/FNDCT N° 22/2024	2024–atual	R\$ 520.000,00
VINA-IA: Inteligência Artificial e Planejamento Baseado em Estrutura para a Descoberta de Inibidores	CNPQ/PQ/2025	2026–atual	Bolsa PQ 1B
Inteligência Artificial e Inovação Terapêutica contra Esquistossomose e Malária: Foco na Diidroorotato Desidrogenase	CNPq/UNIVERSAL2 024	2025–atual	R\$ 210.000,00
SYNAPSE: SYstema Neuroadaptativo Assistido por Plataforma Sensorial	AKCIT/FUNAPE/EM BRAPII	2026–atual	R\$ 840.500,00

Tabela 2 (Cont.) - Coordenação de projetos de pesquisa com financiamento.

Projeto	Edital / Chamada	Período	Valor Aprovado
X-SOFIA: Plataforma Vestível de Olfção Generativa por IA para Imersão Multissensorial Aumentada	AKCIT/FUNAPE/EM BRAPII	2024– atual	R\$ 1.106.700,00
Plataforma brasileira baseada em estratégia integrada de testes in silico e in vitro como alternativa ao uso de animais para avaliação de segurança de produtos químicos	CNPq/MCTI/CT-BIOTEC N° 30/2022	2022– 2026	R\$ 485.972,00
COVID-AI: Plataforma Multidisciplinar e Multicêntrica baseada em IA para acelerar a descoberta e o reposicionamento de fármacos para COVID-19 (BRICS)	CNPq/MCTIC/BRICS -STI N° 19/2020	2021– 2025	R\$ 700.000,00
Estratégia Acelerada por IA para Reposicionamento e Descoberta de Fármacos para COVID-19	FAPEG N° 06/2020	2020– 2025	R\$ 195.000,00
OpenZika: plataforma de ciência aberta para acelerar a descoberta de candidatos a fármacos anti-ZIKV e outras viroses emergentes	IBM World Community Grid	2016– 2020	-
<i>Multi-target drug discovery for Leishmaniasis using integrated strategies in Medicinal Chemistry</i>	UNESCO/ L'OREAL	2015– 2019	USD 50.000,00
Desenvolvimento de Plataforma baseada em modelos híbridos in silico– in vitro como método alternativo para avaliação da toxicidade dérmica de fármacos e cosméticos	CNPq-PVE 2014 — Pesquisador Visitante Especial	2014– 2018	R\$ 160.924,68
Integração de estratégias computacionais e experimentais no planejamento, identificação e avaliação biológica de compostos metálicos candidatos a protótipos de metalofármacos antitumorais	CNPq Universal 14/2013	2013– 2018	R\$ 59.900,00
Integração de estratégias experimentais e computacionais no planejamento, identificação e avaliação bioquímica de novos candidatos a Inibidores da 14α-esterol desmetilase de Leishmania spp.	FAPEG/UNIVERSAL 005/2012	2013– 2018	R\$ 21.000,00

Tabela 2 (Cont.) - Coordenação de projetos de pesquisa com financiamento.

Projeto	Editais / Chamada	Período	Valor Aprovado
Planejamento e triagem <i>in silico</i> de uma biblioteca combinatória baseada em produtos naturais candidatos a novos agentes antiparasitários	Universal 14/2011 — CNPq	2011–2013	R\$ 13.440,00
Planejamento e triagem <i>in silico</i> de uma biblioteca baseada em compostos metálicos candidatos a novos protótipos de metalofármacos antiparasitários	Produtividade em Pesquisa (PQ) — CNPq	2013–2017	Bolsa PQ 2
Planejamento e triagem <i>in silico</i> de uma biblioteca combinatória baseada em produtos naturais candidatos a novos agentes antiparasitários	Universal 14/2011 — CNPq	2011–2013	R\$ 13.440,00
Cooperação entre UFG, USP-SC e USP-RP para planejamento racional de fármacos e desenvolvimento de fitoterápicos para doenças negligenciadas a partir do bioma Cerrado	MCT/CNPq/MEC/CA PES N° 06/2011 Casadinho/PROCAD / Vice-coordenadora	2012–2017	R\$ 372.700,00

II.3. 1. 2. Participação em Projetos de Pesquisa

A **Tabela 3** lista os projetos de pesquisa com financiamento que participo ou participei.

Tabela 3 - Participação em projetos de pesquisa com apoio financeiro.

Projeto	Editais / Agência de Fomento	Coordenador(a)	Período
<i>New drug targets essential for critical life cycle stages of Plasmodium vivax infection</i>	Swedish Research Council (SRC)	Per Sunnerhagen	2025–atual
Desenvolvimento inteligente de biblioteca de fragmentos: Integração de IA e fragmentos naturais e sintéticos para combate a doenças negligenciadas	CNPq/Internacional	Flavio da Silva Emery	2023–atual
Descoberta de inseticidas eco-sustentáveis para o controle de <i>Aedes aegypti</i> utilizando inteligência artificial	PPSUS FAPEG-CNPq N° 05/2020	Bruno Junior Neves	2021–atual

Tabela 3 (Cont.) - Participação em projetos de pesquisa com apoio financeiro.

Projeto	Edital / Agência de Fomento	Coordenador(a)	Período
Inteligência artificial para predição de potencial carcinogênico (TD50) de produtos químicos	FUNAPE Jovens Pesquisadores N° 01/2022	Bruno Junior Neves	2022–atual
Estratégia Acelerada por IA para Reposicionamento de Fármacos contra COVID-19	FAPESP/Regular	Fabio T. M. Costa	2020–2025
Reposicionamento de fármacos e busca de inibidores seletivos para a enzima DHODH humana como estratégia no combate a COVID-19	FAPESP/Regular	Maria Cristina Nonato	2021–atual
<i>Target-based strategy for new antimalarial molecules against drug-resistant Plasmodium vivax and P. falciparum in South America, Africa, and South-East Asia</i>	Swedish Research Council (SRC)	Per Sunnerhagen	2021–2023
Estratégia Acelerada por IA para Reposicionamento de Fármacos contra COVID-19	FAPESP/Regular	Fabio T. M. Costa	2020–2025
<i>Overcoming Plasmodium vivax drug resistance by target-oriented screening in vivo and in silico</i>	CAPES / STINT (Suécia)	Elizabeth Bilsland	2019–2024
Inteligência Artificial e Estratégias Integradas para Descoberta e Otimização de Novos Compostos Antiparasitários de Tripanossomatídeos	Universal/CNPq 2018 — Faixa A	Bruno Junior Neves	2019–2024
Desenvolvimento de novas ferramentas para busca e validação de alvos moleculares para terapia contra Plasmodium vivax	FAPESP Temático	Fabio T. M. Costa	2018–2025
Identificação de novos tratamentos antimaláricos através de abordagem de reposicionamento centrada no alvo	FCT (Portugal)-FAPESP	Fabio T. M. Costa / Pedro V. L. Cravo	2018–2022
Estratégias integradas para avaliação da toxicidade de compostos e desenvolvimento de servidor para identificação toxicológica <i>in silico</i>	FAPEG N° 012/2012	Vinicius de Medeiros Alves	2013–2015

Tabela 3 (cont.) - Participação em projetos de pesquisa com apoio financeiro.

Projeto	Edital / Agência de Fomento	Coordenador(a)	Período
Previsão <i>in silico</i> e produção <i>in vitro</i> por bioconversão de metabólitos humanos de candidatos a protótipos de fármacos	CNPq	Valéria de Oliveira	2010–2014
Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia — INCT-IM-INOVAR	CNPq	Eliezer J. L. Barreiro	2009–2014
Identificação de metabólitos gerados por novo fármaco cardiotônico LASSBio 294 e sua ação sobre o sistema cardiovascular de cães	CNPq	Rosângela O. Alves	2009–2013
Planejamento, Identificação e Avaliação Bioquímica de novos agentes antiparasitários: inibidores da 14α-esterol desmetilase	CNPq / FAPEG	José Ricardo Sabino	2009–2013

II.4. ATIVIDADE FORMADORA

A formação de recursos humanos é, para mim, uma das dimensões mais gratificantes e responsáveis da carreira acadêmica. Ao longo de dezesseis anos na UFG, foram mais de 75 trabalhos orientados. Orientei trabalhos de conclusão de Curso de Graduação (TCC), Iniciações científicas, Mestrados, Doutorados e supervisão de pós-doutorados. Destas orientações, vários foram os produtos, como monografias, dissertações, teses, artigos publicados em periódicos da área, depósitos de patentes, e programas de computador. Atuei e atuo nos Programas de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas (PPGCF-UFG), em Medicina Tropical e Saúde Pública (PPGMTSP-UFG), e atuei no Programa de Inovação Farmacêutica em rede com UFG, UFPA, UFAM e UNIFAP (PPGIF), entre os anos de 2012 a 2017.

Participei de 92 bancas de trabalhos de conclusão e exames de qualificação que fazem parte do *Curriculum Lattes*.

A seguir, listo as orientações de Iniciação Científica (Tabela 4), Mestrado (Tabelas 5 e 6), Doutorado (Tabela 8) e supervisão de Pós-Doutorado (Tabela 8), e respectivos títulos dos trabalhos.

II.4. 1. Iniciação Científica

Tabela 4. Iniciação científica sob minha orientação, ano de finalização e o título de trabalho orientado.

Orientando(a)	Título do Trabalho	Curso	Ano
Lucas Josué Santos Sobral	Desenvolvimento de modelos de QSAR para avaliação de toxicidade de misturas de produtos químicos	Farmácia	2025
Lais Silva Guerra	Inteligência artificial para a busca de proteases de Plasmodium vivax e P. falciparum e identificação de candidatos promissores a fármacos antimaláricos	Biotecnologia	2025
Francisco Lucas Feitosa de Oliveira	Desenvolvimento de modelos de QSAR para avaliação da potência de sensibilização dérmica de produtos químicos	Farmácia	2024
Ester Souza	Modelos computacionais integrados para investigação de Disruptores Endócrinos de Progesterona	Biotecnologia	2024
Ana Carolina de Amorim Barros	Planejamento racional de fármacos com atividade contra multi-espécies de arboviroses: uma abordagem multi-task learning	Farmácia	2024
Francisco Lucas Feitosa de Oliveira	Desenvolvimento de modelos de Inteligência Artificial para predição de citotoxicidade de candidatos a fármacos contra COVID-19	Farmácia	2023
Ana Carolina de Amorim Barros	Inteligência Artificial e modelagem molecular para a descoberta de inibidores da proteína NSP4 do vírus Chikungunya	Farmácia	2023
Victoria Ferreira Cabral	Desenvolvimento de modelos de Inteligência Artificial para predição de citotoxicidade de candidatos a fármacos contra COVID-19	Biotecnologia	2022
Murillo Vinícius de Freitas	Inteligência artificial e modelagem molecular para a descoberta de inibidores da proteína NSP4 do vírus Chikungunya	Farmácia	2022
Igor Henrique Sanches Silva	Busca por compostos com potencial inibitório contra a protease quimiotripsina-like (MPro) de SARS-CoV-2 como estratégia no combate à COVID-19	Farmácia	2021

Tabela 4 (Cont.) – Iniciação científica sob minha orientação, ano de finalização e o título de trabalho orientado.

Orientando(a)	Título do Trabalho	Curso	Ano
Victor Lopes de Castro	Triagem virtual baseada em docking e QSAR de potenciais inibidores da proteína NS5 do vírus Zika	Farmácia	2021
Luiza Vieira da Cruz	Integração de estratégias computacionais e experimentais para o planejamento, identificação e avaliação do potencial antiparasitário e antimicrobiano de xantonas	Farmácia	2020
Paulo Ricardo Pimenta da Silva Ramos	Triagem virtual baseada em docking e QSAR de potenciais inibidores da proteína NS5 do vírus Zika	Farmácia	2019
Driele Cunha de Paiva Almeida	Planejamento racional de novos inibidores da proteína Bcl-xL na busca por novos agentes antitumorais	Farmácia	2016
Cláudio Brenner Sales Sena	Planejamento racional de novos inibidores da proteína quinase CDK-9 na busca por novos agentes antitumorais	Farmácia	2016
Meryck Felipe Brito da Silva	Desenvolvimento de modelos farmacocinéticos baseados na fisiologia (PBPK) para predição do volume de distribuição de candidatos a fármacos	Farmácia	2015
Ney Ramos Toledo	Planejamento racional de novos inibidores da proteína Bcl-xL na busca por novos agentes antitumorais	Farmácia	2015
Elias Matias Laurentino	Planejamento racional de novos inibidores multi-alvo das enzimas CYP51 e piruvato quinase na busca por novos agentes leishmanicidas	Farmácia	2015
Ney Ramos Toledo	Busca por novos candidatos a fármacos antitumorais através de estratégias do CADD	Farmácia	2014
Meryck Felipe Brito da Silva	Desenvolvimento de modelos de QSAR para a predição in silico da toxicidade de novos candidatos a fármacos	Farmácia	2014

Tabela 4 (Cont.) – Iniciação científica sob minha orientação, ano de finalização e o título de trabalho orientado.

Orientando(a)	Título do Trabalho	Curso	Ano
Weber José Ribeiro Terra	Aplicação de metodologias do CADD na identificação dos sítios do metabolismo de novos candidatos a protótipos de fármacos	Farmácia	2013
Elias Matias Laurentino	Desenvolvimento de modelos farmacofóricos da enzima 14 alfa-esterol desmetilase de Leishmania sp. na busca de novos agentes leishmanicidas	Farmácia	2013
Marina Rocha Martins	Estudos de QSAR e planejamento de novos candidatos a fármacos antimaláricos	Farmácia	2013
Arthur de Carvalho e Silva	Triagem virtual de uma biblioteca baseada em produtos naturais candidatos a novos agentes antichagásicos	Farmácia	2013
Marina Rocha Martins	Estudos de Dinâmica Molecular e QM/MM para investigação das reações mediadas por citocromo P450 com novos candidatos a protótipos de fármacos	Farmácia	2012
Elias Matias Laurentino	Estudos de modelagem molecular e mapeamento de farmacóforo da enzima 14 α -esterol desmetilase para o planejamento de novos agentes leishmanicidas	Farmácia	2012
Ney Ramos Toledo	Triagem virtual de uma biblioteca baseada em produtos naturais candidatos a novos agentes antichagásicos	Farmácia	2012
Ney Ramos Toledo	Aplicação de metodologias do CADD a inibidores da 14 alfa-esterol desmetilase: triagem virtual e busca por novos candidatos a fármacos antichagásicos	Farmácia	2011
Vinicius de Medeiros Alves	Aplicação de metodologias do CADD a inibidores da 14 alfa-esterol desmetilase: triagem virtual e busca por novos candidatos a fármacos antichagásicos	Farmácia	2011

Tabela 4 (Cont.) – Iniciação científica sob minha orientação, ano de finalização e o título de trabalho orientado.

Orientando(a)	Título do Trabalho	Curso	Ano
Isaac Yves Lopes de Macedo	Aplicação de QM/MM para o estudo do mecanismo de reações do metabolismo mediadas por citocromo P450 de novos candidatos a protótipos de fármacos	Farmácia	2011
Larissa de Oliveira Magalhães	Estudos de QSAR de flavonóides inibidores da enzima enoil redutase de Plasmodium falciparum como novos candidatos a agentes antimaláricos	Farmácia	2011
Diego Cabral Silva	Planejamento e Triagem in silico de uma biblioteca combinatória baseada em produtos naturais inibidores da 14 alfa-esterol desmetilase do Trypanosoma cruzi	Farmácia	2011
Elias Matias Laurentino	Utilização de metodologias do CADD na identificação dos sítios do metabolismo de novos candidatos a protótipos de fármacos	Farmácia	2011
Vinícius de Medeiros Alves	Aplicação de metodologias do CADD a inibidores da 14 alfa-esterol desmetilase: mapeamento de farmacóforo e planejamento de novos antichagásicos potenciais	Farmácia	2010
Cleber Camilo de Melo Filho	Estudos de modelagem molecular e relação estrutura-atividade de inibidores da 14 alfa-esterol desmetilase como potenciais agentes leishmanicidas	Farmácia	2010

II.4. 2. Mestrado

Tabela 5. Dissertações de mestrado concluídas sob minha orientação, nome do orientando, PPG de titulação, ano de titulação e produto oriundo do trabalho de mestrado.

Orientando(a)	Título da Dissertação	PPG	Ano
Victoria Ferreira Cabral	Busca de inibidores da proteína RNA polimerase dependente de RNA de SARS-CoV-2	PPGCF	2025
Igor Henrique Sanches	Estratégia computacional integrada para avaliação de cardiotoxicidade de candidatos a fármacos pelo bloqueio da hERG	PPGCF	2025
Luiza Vieira da Cruz	Identificação de inibidores da enzima Diidroorotato Desidrogenase Humana (HsDHODH) através de abordagens computacionais como candidatos a fármacos para o controle da Covid-19	PPGMTSP	2023
Paulo Ricardo Pimenta da Silva Ramos	Abordagens computacionais e experimentais para identificação e otimização de compostos ativos contra viroses emergentes	PPGCF	2022
Bruna Katiele de Paula Sousa	Estratégias computacionais e experimentais para identificação de inibidores das proteínas protease e helicase dos vírus Dengue e Zika	PPGCF	2020
Sabrina Silva Mendonça	Planejamento racional de fármacos com atividade inibitória da família de proteínas quinases para o tratamento da malária vivax	PPGCF	2020
Steven Umualê Silva Hall	Estratégias de Quimioinformática para Avaliação da Toxicidade Oral Aguda de Compostos Químicos	PPGCF	2019
Marília Nunes do Nascimento	Desenvolvimento de modelos de QSAR e planejamento de novos inibidores da enzima dUTPase de Plasmodium falciparum	PPGCF	2015
Flávia Cristina da Silva	Desenvolvimento de modelos de QSAR para identificação de substratos e inibidores de CYP3A4	PPGCF	2015
Arthur de Carvalho e Silva	Planejamento e identificação de novos candidatos a protótipos de fármacos antitumorais	PPGCF	2015
Diego Cabral Silva	Reposicionamento de fármacos para Leishmania spp: Estratégias "in silico" e avaliação experimental	PPGMTSP	2015

Tabela 5 (Cont.) – Orientações de mestrado.

Orientando(a)	Título da Dissertação	PPG	Ano
Vinícius de Medeiros Alves	Análise quimiinformática da toxicidade de compostos e triagem virtual	PPGCF	2014
Karlla Gonçalves de Macedo	Estudos de SAR e QSAR para um conjunto de triazolopirimidinas inibidores da enzima diidroorotato desidrogenase de Plasmodium falciparum	PPGCF	2014
Cléber Camilo de Melo Filho	Planejamento e identificação de novos agentes esquistossomicidas a partir de estratégias em Química Medicinal	PPGCF	2014
Renata Vieira Bueno	Planejamento de Novos Candidatos a Fármacos Tuberculostáticos: Modelagem Molecular e QSAR	PPGCF	2013
Bruno Júnior Neves	Planejamento racional de inibidores da enzima enoil-ACP redutase de Plasmodium falciparum	PPGCF	2013
Mariana Côrtes de Sousa	Estudos de modelagem molecular para previsão in silico dos prováveis metabólitos de fase I de flavonóides	PPGCF	2012

Tabela 6. Co-orientações de mestrado concluídas, nome do orientando, PPG de titulação, ano de titulação e produto oriundo do trabalho de mestrado.

Orientando(a)	Título da Dissertação	PPG	Ano
Mayara Fregonezi Paludetti	Desenvolvimento de um modelo de inteligência artificial para predição da mutagenicidade de composições naturais da biodiversidade brasileira	Química/UNICAMP	2025
Vinícius Alexandre Fiaia Costa	Planejamento Baseado em Fragmentos para a Descoberta de Inibidores de prolil oligopeptidase 80 de Trypanosoma cruzi	PPGMTSP/UFG	2020
Morgana Elias Arantes	Reposicionamento in silico de novos fármacos contra o Schistosoma mansoni	PPGMTSP/UFG	2016

Tabela 6 (Cont.) – Co-orientações de mestrado concluídas.

Orientando(a)	Título da Dissertação	PPG	Ano
Amanda Alves de Oliveira	Reposicionamento quimiogenômico: identificação de novos fármacos com potencial bioativo contra a paracoccidiodomicose	PPGMTSP/UFG	2016
José Teófilo Moreira Filho	Planejamento e Identificação de Novos Compostos Moluscicidas para Biomphalaria glabrata (Mollusca, Planorbidae)	Biol. Rel. Parasito-Hospedeiro/UFG	2014

II.4. 3. Doutorado

Tabela 7. Teses de doutorado concluídas sob minha orientação, nome do orientando, PPG de titulação, ano de titulação e título da tese.

Orientando(a)	Título da Tese	PPG	Ano
Sabrina Silva Mendonça	Descoberta de inibidores da quimiotripsina-like protease (Mpro) de SARS-CoV-2: integração de estratégias computacionais e avaliação experimental	PPGMTSP	2025
Bruna Katiele de Paula Sousa	Abordagem orientada por alvos e triagens in silico e in vitro para identificar novos candidatos antimaláricos	PPGMTSP	2024
José Teófilo Moreira Filho	Planejamento, identificação e otimização de novos compostos ativos contra as fases juvenil e adulta de Schistosoma mansoni como potenciais agentes esquistossomicidas	PPGMTSP	2020
Joyce Villa Verde Bastos Borba	Planejamento e identificação de inibidores de proteínas quinases com atividade leishmanicida: Bioinformática, quimioinformática e avaliação experimental	PPGMTSP	2019
Marilia Nunes do Nascimento	Planejamento racional de novos candidatos a fármacos antimaláricos multi-alvo: bioinformática, quimioinformática e avaliação experimental	PPGMTSP	2019

Tabela 7 (Cont.) – Teses de doutorado concluídas sob minha orientação.

Orientando(a)	Título da Tese	PPG	Ano
Arthur de Carvalho e Silva	Reposicionamento de fármacos e identificação de inibidores de quinases para o tratamento da esquistossomose	PPGMTSP	2019
Cleber Camilo de Melo Filho	Identificação de novos compostos bioativos contra tripanossomatídeos a partir de estratégias integradas em Química Medicinal	PPGMTSP	2018
Vinicius de Medeiros Alves	Estratégias computacionais como métodos alternativos para avaliação da sensibilização cutânea	PPGIF	2017
Bruno Júnior Neves	Reposicionamento de fármacos e planejamento de novos compostos ativos contra <i>Schistosoma mansoni</i>	PPGMTSP	2016
Juliana Rodrigues	Identificação de novos fármacos antimaláricos através de estratégia de quimiogenômica por reposicionamento e validação experimental	PPGMTSP	2015
Marcelo do Nascimento Gomes	Planejamento, síntese guiada por QSAR, avaliação biológica e modelagem molecular de chalconas com atividade antituberculose	PPGIF	2013
Rodolpho de Campos Braga (Co-orientação)	Estratégias Integradas em Química Medicinal para a identificação de novos compostos bioativos contra <i>Leishmania infantum</i>	PPGQ/UFG	2015

Tabela 8. Supervisões de pós-doutorado concluídas.

Orientando(a)	Programa / Financiamento	PPG	Ano
Joyce Villa Verde Bastos Borba	Supervisão de pós-doutorado (FUNAPE/AKCIT)	PPGCF	2025
Melina Mottin	Supervisão de pós-doutorado (FUNCAMP)	PPGCF	2024
Melina Mottin	Supervisão de pós-doutorado (FUNCAMP)	PPGMTSP	2023
Joyce Villa Verde Bastos Borba	Supervisão de pós-doutorado (FAPESP)	PPGMTSP	2023

Tabela 8 (Cont.) – Supervisões de pós-doutorado concluídas.

Orientando(a)	Programa / Financiamento	PPG	Ano
Melina Mottin	Supervisão de pós-doutorado (CNPq)	PPGMTSP	2019
Guilhermino Pereira Nunes Junior	Supervisão de pós-doutorado/sem bolsa	PPGCF	2023
Kateryna Varlamova	Supervisão de pós-doutorado (CNPq)	PPGMTSP	2015

Um levantamento sistemático do destino atual dos egressos de mestrado e doutorado do LabMol, sintetizado na **Figura 5**, revela uma trajetória coletiva de alto impacto, marcada pela diversidade de inserções e pela expressiva internacionalização.

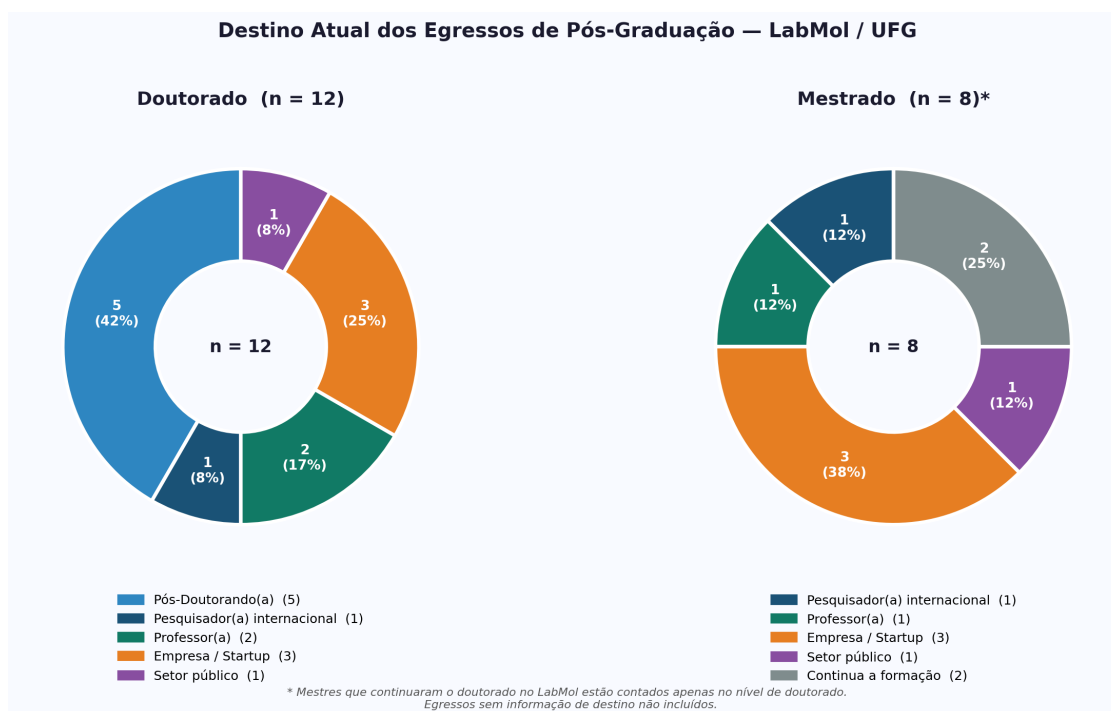


Figura 5. Destino atual dos egressos de mestrado e doutorado sob a minha orientação, com informação de destino.

Cabe ressaltar que dos 12 doutores formados, cinco encontram-se em pós-doutorado em instituições de excelência: *University of North Carolina at Chapel Hill*, *National Institute of Environmental Health Sciences* (NIEHS), *University of Birmingham* (UK) e UFG; uma doutora recém-formada atua como pesquisadora na Suécia; três seguiram para empresas e startups de tecnologia de alto impacto, sendo que um tornou-se Cientista Principal na Novartis (San Diego, EUA), enquanto outros dois fundaram ou lideram empresas brasileiras

de inteligência artificial aplicada à descoberta de fármacos, a InsiChem; dois tornaram-se docentes, um na própria Faculdade de Farmácia da UFG, consolidando uma linhagem científica interna; e um atua no setor público de saúde do Estado de Goiás. Entre os 8 mestres com destino identificado, considerados apenas aqueles que não continuaram o doutorado no próprio LabMol, a diversidade de trajetórias se repete: três ingressaram em empresas nacionais e internacionais (Natura, CIFARMA e ITR Laboratories no Canadá); uma seguiu para pesquisa acadêmica na *Northeastern University* (EUA) e atualmente atua na Gerência de Produtos da ANVISA; uma assumiu posição docente em instituição de ensino superior em Goiás; uma atua no setor público estadual; e dois continuaram a formação como doutorandos, um no Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas da UFG e outro na Faculdade de Ciências Farmacêuticas da USP, o que reflete a continuidade do interesse científico cultivado no grupo. No total, 20 egressos têm destino atual conhecido, e sete deles atuam fora do Brasil, em universidades e empresas nos Estados Unidos, Reino Unido, Canadá e Suécia, o que representa uma taxa de internacionalização expressiva para um grupo baseado em uma Universidade Federal do Centro-Oeste. Esse mapa de destinos não é trivial: ele demonstra que o LabMol forma pesquisadores com competências suficientemente sólidas para transitar entre a academia de ponta, a indústria farmacêutica global e o serviço público, contribuindo para o desenvolvimento científico e tecnológico em múltiplas frentes.

O caráter internacional da formação oferecida pelo LabMol não se restringe ao destino pós-doutoramento: durante o percurso formativo, seis orientandos realizaram estágios de pesquisa em universidades e centros internacionais de excelência, financiados por bolsas das principais agências de fomento brasileiras (CAPES-PDSE, CNPq-SWE, CNPq-BRICS, CAPES-STINT), como destaque a seguir: (1) Sabrina Silva Mendonça: missão de pesquisa na University of Cape Town (África do Sul, ago. 2021), missão de pesquisa na Ersilia IO (Barcelona, Espanha, set. 2022) e doutorado sanduíche CAPES-PDSE na University of Bonn (Alemanha, 2022–2023); (2) Arthur de Carvalho e Silva: doutorado sanduíche CAPES-PDSE na London School of Hygiene and Tropical Medicine (Londres, Reino Unido, ago. 2018–jul. 2019); (3) Marília Nunes do Nascimento: doutorado sanduíche CAPES-PDSE na Università di Bologna (Itália, set. 2017–mai. 2018); (4) Joyce Villa Verde Bastos Borba: doutorado sanduíche CNPq-SWE na University of North Carolina at Chapel Hill (EUA, mai. 2018–abr. 2019); (5) Bruna Katiele de Paula Sousa: doutorado sanduíche CAPES-STINT na University of Gothenburg (Suécia, nov. 2021–nov. 2022); (6) José Teófilo Moreira Filho: doutorado sanduíche CNPq-SWE na Università di Torino (Itália, set. 2019–fev. 2020).

O que mais me orgulha, entretanto, não são os números: são os destinos que esses pesquisadores escolheram após deixar o LabMol. Entre os egressos

que hoje ocupam posições de destaque na academia e na indústria, no Brasil e no Exterior, destaco os seguintes:

Vinicius de Medeiros Alves: Iniciou sua trajetória no LabMol na iniciação científica e percorreu o caminho completo — mestrado e doutorado — antes de seguir para a University of North Carolina at Chapel Hill, onde atuou como Professor Assistente. Depois, atuou como cientista na Takeda Pharmaceuticals, em San Diego e hoje é Cientista Principal na Novartis, também em San Diego (EUA). Ao longo desse percurso, foi agraciado com o Prêmio CAPES-Natura Campus de Excelência em Pesquisa de 2020 (selecionado entre mais de 150 finalistas), o Lush Prize Young Researcher Americas (2018) o Best Published Paper da Society of Toxicology (2023) e o CINF Excellence Award Scholarship (2014), uma trajetória de excelência internacional com origem direta na formação construída no LabMol.

José Teófilo Moreira Filho: foi meu co-orientando de mestrado, depois doutorado. Hoje está realizando Pós-doutorado no National Institute of Environmental Health Sciences (NIEHS, EUA), uma das principais referências mundiais em saúde ambiental e toxicologia computacional. Seu trabalho integra modelagem molecular e aprendizado de máquina na predição de toxicidade ambiental, campo em que o LabMol contribuiu decisivamente para sua formação.

Cleber Camilo de Melo Filho: Também iniciou sua trajetória no LabMol na iniciação científica, fez mestrado e doutorado. Atua hoje como Pesquisador de pós-doutorado na University of North Carolina at Chapel Hill (EUA), sob a supervisão do Prof. Alexander Tropsha.

Arthur de Carvalho e Silva: Fez o caminho completo no LabMol (IC, mestrado e doutorado). Atua hoje como Pesquisador de pós-doutorado na University of Birmingham (Reino Unido).

Bruna Katiele de Paula Sousa: Fez mestrado e doutora pelo LabMol, atua como pesquisadora na Suécia, o mais recente exemplo da capacidade do grupo de preparar pesquisadores para inserção imediata em ambientes científicos internacionais altamente competitivos.

Renata Vieira Bueno: Fez mestrado no LabMol, doutorado na USP de São Carlos e atua na Gerência de Produtos Biológicos na ANVISA e é pesquisadora associada da UnB, no PPGBiomol. Foi pesquisadora associada na *Northeastern University* (EUA). Egressa do mestrado, sua trajetória internacional demonstra que a inserção global não é exclusividade dos doutores formados no grupo.

Steven Umualê Silva Hall: Analista de Dados na ITR Laboratories Inc. (Canadá). Egresso do mestrado com atuação no setor privado de tecnologia no exterior.

Rodolpho de Campos Braga: *Chief Technology Officer* (CTO) da InsilicAll, empresa brasileira de inteligência artificial aplicada à descoberta de

fármacos que co-fundou após o doutorado no LabMol, sendo um exemplo concreto de empreendedorismo científico de base tecnológica enraizado na formação acadêmica do grupo.

Marcelo do Nascimento Gomes: Co-fundador da InsiChem, startup brasileira do mesmo segmento de IA para descoberta de fármacos. Junto com Rodolpho, representa uma rota de empreendedorismo científico pouco comum no país, em que pesquisadores com formação em química medicinal computacional transformaram conhecimento acadêmico em empresa de base tecnológica.

Bruno Junior Neves: Fez mestrado e doutorado no LabMol e hoje é Professor Adjunto na Faculdade de Farmácia da UFG. Retornou à mesma instituição onde se formou como docente e pesquisador, construindo sua própria linha de pesquisa e reforçando a linhagem científica do LabMol dentro da própria UFG.

Juliana Rodrigues: Professora Titular na Secretaria de Estado de Educação, Cultura e Esporte de Goiás, contribuindo para a formação de jovens goianos.

Além dos egressos, registro o destaque de orientandos ainda em formação. Francisco Lucas de Oliveira, meu aluno de iniciação científica e tecnológica (PIBITI), foi agraciado com o 21º Prêmio Destaque na Iniciação Científica e Tecnológica do CNPq (2024) pelo projeto intitulado 'Desenvolvimento de Modelos de Inteligência Artificial para Predição de Citotoxicidade de Candidatos a Fármacos contra COVID-19', com apoio da FAPEG e do CNPq. O trabalho foi ainda destacado na Reunião Anual da SBPC em 2024.

Minha orientanda de mestrado Luiza Vieira da Cruz recebeu o IX Prêmio SBPC-GO de Popularização da Ciência (2022), concedido pela Sociedade Brasileira para o Progresso da Ciência — Regional Goiás, com seu trabalho sobre utilização de IA para acelerar o desenvolvimento de fármacos contra a COVID-19.

Ao longo de toda essa trajetória formativa, destaco o compromisso especial com a formação de mulheres cientistas. Anualmente, instruo cerca de 50 alunas de graduação e já orientei mais de uma dúzia de mulheres em mestrados e doutorados em Ciências Farmacêuticas e Medicina Tropical e Saúde Pública. Fui coordenadora do Núcleo Mulheres da SBQ (gestão 2020–2022), e ministrei diversas palestras promovendo a visibilidade das contribuições femininas na química e a redução da desigualdade de gênero na área.

III. EXTENSÃO

III. ATIVIDADES DE EXTENSÃO

III.1. ORGANIZAÇÃO DE EVENTOS CIENTÍFICOS

Ao longo da carreira, coordenei e participei de projetos de extensão voltados para a popularização da ciência, a formação de jovens pesquisadores e o diálogo entre universidade e sociedade. A Escola de Quimioinformática para a América Latina (School of Cheminformatics in Latin America), publicada em artigo no Journal of Cheminformatics (A1, 2023), é um exemplo concreto de como a extensão universitária pode transformar a realidade científica de uma região.

Em 2011, integrei a comissão organizadora da XVII Semana Científica Farmacêutica da Faculdade de Farmácia da UFG, contribuindo para a programação científica e a articulação das atividades de extensão do evento.

Em 2013, coordenei a organização do XII Encontro Nacional de Professores de Química Farmacêutica, que ocorreu em março de 2013, evento que reuniu docentes de todo o país para debate sobre currículos, metodologias e perspectivas do ensino de Química Farmacêutica e Medicinal. As atividades de organização foram registradas como projeto de extensão cadastrado na PROEC-UFG. Além disso, apresentamos o uso de metodologias computacionais em aulas práticas de graduação, experiência publicada na Revista Eletrônica de Farmácia da UFG. Este foi o primeiro evento que organizei, e foi um sucesso.

Em 2019, atuei como presidente da comissão organizadora do 9th Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry (BrazMedChem 2019), realizado em setembro de 2019, em Pirenópolis-GO, sendo este o maior evento de Química Medicinal da América Latina. O evento incluiu cerca de 500 participantes de diversos países do mundo. Durante o evento, realizamos uma importante atividade de divulgação científica para estudantes de escolas públicas da região, em que fizemos uma exposição sobre Química e Ciências e tivemos a participação de cerca de 200 estudantes de ensino fundamental e médio.

Além desses, atuei na organização de diversos outros eventos científicos ao longo da carreira, incluindo o Congresso Farmacêutico Brasileiro (CFBC, 2013 e 2016), a 39^a, 42^a e 43^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (RASBQ), o Workshop de Jovens Pesquisadores em Planejamento de Fármacos (2014) e os Simpósios de Doenças Negligenciadas (2009, 2011 e 2016), além do 10th *Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry*

(BrazMedChem 2020), consolidando minha atuação na promoção e divulgação da ciência em âmbito nacional e internacional.

Além de organizar eventos científicos, já participei de diversas ações sobre Mulheres na Ciência, com palestras, mesas-redondas e iniciativas que visam ampliar o engajamento e a representatividade feminina na pesquisa científica brasileira, especialmente em áreas tradicionalmente masculinas como a Química e a Inteligência Artificial.

III.2. PALESTRANTE EM EVENTOS CIENTÍFICOS NACIONAIS

No cenário nacional, tenho contribuído de forma consistente para o fortalecimento da Química Medicinal brasileira como palestrante, coordenadora de mesas redondas e membro de comissões organizadoras em eventos de destaque.

Ao longo de 16 anos de carreira na UFG, ministrei palestras e conferências em 43 eventos científicos nacionais (2010–2025), documentados no Lattes e nos RADOCS. Desse total, 21 foram como palestrante convidada ou conferencista de abertura, o que reflete o reconhecimento pela comunidade científica brasileira como referência nas áreas de Químioinformática, Química Medicinal Computacional e Inteligência Artificial aplicada à descoberta de fármacos. As participações abrangem os principais fóruns científicos nacionais: Reuniões Anuais da Sociedade Brasileira de Química (SBQ), Simpósio Brasileiro de Química Teórica (SBQT), Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry (BrazMedChem), Brazilian Colloquium on Medicinal Chemistry, Workshops de Jovens Pesquisadores em Planejamento de Fármacos (USP), Webinários FAPESP e ABC, além de seminários institucionais em universidades e institutos de pesquisa em 14 estados brasileiros (GO, SP, RJ, MG, PR, BA, CE, SC, AL e outros). A lista completa encontra-se na tabela apresentada na Tabela 9.

Tabela 9 - Palestras em Eventos Científicos Nacionais (2010–2025).

Ano	Tipo	Título da Palestra	Evento	Local
2025	Divulgação científica	Como a Inteligência Artificial Mapeia a Química do Olfato para o Mundo Virtual	Café com Ciência, UFG	Goiânia, GO
2025	Divulgação científica	Inteligência Artificial que faz bem à saúde: pesquisas para desenvolvimento de fármacos	Pint of Science Brazil	Goiânia, GO
2025	Divulgação científica	Entendendo o processo de revisão por pares	ACS Publications	Virtual, Brasil
2025	Palestra de Abertura	Do Genoma ao Medicamento: O Papel da IA em Revolucionar Biológicos e Moléculas Pequenas	Seminário IPTSP, UFG	Goiânia, GO

Tabela 9 (Cont.) – Palestras em Eventos Científicos Nacionais (2010–2025).

Ano	Tipo	Título da Palestra	Evento	Local
2025	Palestra convidada	Como a Inteligência Artificial está remodelando a Saúde e a Indústria Farmacêutica	Projeto Em Pauta – Portal de Periódicos CAPES	Virtual, Brasil
2025	Mesa-Redonda	Inteligência Artificial e os Prêmios Nobel de Física e Química: Quem Fez o Quê?	Reunião SBPC	Vitória, ES
2025	Palestra convidada	Da Bancada à Inteligência Artificial: A Jornada de uma Farmacêutica na Descoberta de Fármacos	Semana Científica Farmacêutica - PUC Minas	Belo Horizonte, MG
2024	Sessão temática	Aplicação da Inteligência Artificial na Química de Materiais e Medicinal	47ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (47ª RASBQ)	Águas de Lindóia, SP
2024	Palestra convidada	COVID-AI: Acelerando a Descoberta de Fármacos para COVID-19 — Lições de uma Colaboração BRICS	47ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (47ª RASBQ)	Águas de Lindóia, SP
2024	Seminário	SOFIA: Sensorial Olfactory Framework Immersive AI	Aula Inaugural do Doutorado do PPGMC-UESC	Ilhéus, BA
2024	Palestra convidada	Inovação Sustentável: A transformação da Indústria de Cosméticos Impulsionada pela IA	Workshop ABIHPEC de Inovação, durante a <i>In Cosmetics LATAM</i>	São Paulo, SP
2024	Seminário	Ferramentas de IA para Descoberta de Novos Fármacos	Seminários do Departamento de Bioquímica e Imunologia — UFMG	Belo Horizonte, MG
2023	Palestra convidada	Aplicações de Aprendizado de Máquina em Química Farmacêutica e Medicinal	XIV Encontro Nacional de Professores de Química Farmacêutica e Medicinal	Fortaleza, CE
2023	Palestra convidada	O Papel da IA na Revolução Tecnológica da Indústria Farmacêutica	IX Simpósio sobre Inovação e Tecnologia — SIINTEC	Salvador, BA
2023	Palestra convidada	IA e Descoberta de Hits para Doenças Tropicais Negligenciadas	47th Annual Meeting of the Brazilian Biophysical Society	Campinas, SP
2023	Seminário institucional	Abordagens Computacionais para Descoberta de Fármacos e Toxicologia	Seminários PPGCF — Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas	Goiânia, GO
2022	Palestra convidada	IA e Quimioinformática na Descoberta de Fármacos para Doenças Negligenciadas	45ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (45ª RASBQ)	Goiânia, GO
2022	Seminário institucional	Estratégias Computacionais para Doenças Negligenciadas	Seminários em Farmacologia — FIOCRUZ-CE	Fortaleza, CE

Tabela 9 (Cont.) – Palestras em Eventos Científicos Nacionais (2010–2025).

Ano	Tipo	Título da Palestra	Evento	Local
2022	Palestra convidada	Artificial Intelligence for accelerating Drug Discovery for Neglected and Emerging Diseases	6th ABCF Congress	Brasília, DF
2022	Palestra convidada	Plataformas <i>in silico</i> para predição de propriedades toxicológicas de compostos químicos, fármacos e cosméticos	II Simpósio de Química Farmacêutica & Medicinal, organizado pela UEL, Paraná	Virtual, Brasil
2021	Webinário	Artificial Intelligence-Assisted Drug Discovery for COVID-19	Webinário FAPESP — Inteligência Artificial em COVID-19	Virtual, Brasil
2021	Palestra convidada	Artificial Intelligence-Assisted Drug Discovery for Neglected and Emerging Diseases	XXI Simpósio Brasileiro de Química Teórica (SBQT)	Virtual, Brasil
2021	Palestra convidada	Estratégia Acelerada por IA para Reposicionamento de Fármacos para COVID-19	Evento do Dia do Pesquisador — FAPEG	Virtual, Brasil
2020	Webinário	Modelos de IA para Descoberta de Antivirais	Webinar ABC — Academia Brasileira de Ciências	Virtual, Brasil
2020	Congresso	Quimioinformática e Doenças Negligenciadas	V ABCF Congress — Associação Brasileira de Ciências Farmacêuticas	Virtual, Brasil
2020	Webinário	Química Medicinal Computacional na Era dos Dados	MED na Rede — Divisão de Química Medicinal, SBQ	Virtual, Brasil
2019	Palestra convidada	Inteligência Artificial para acelerar a descoberta de fármacos para doenças negligenciadas	4º Simpósio do Programa de Pós-Graduação em Patologia Molecular da UnB	Brasília, DF
2019	Palestra convidada	Aplicação de Métodos <i>in silico</i> e a predição do potencial alergênico	Workshop ABIHPEC de Inovação — Métodos Alternativos ao Uso de Animais	São Paulo, SP
2019	Palestra convidada	IA aplicada à descoberta de fármacos para doenças negligenciadas (Conferência de abertura)	III Workshop de Jovens Pesquisadores em Planejamento e Desenvolvimento de Fármacos	São Paulo, SP
2019	Palestra de abertura	Inteligência Artificial para acelerar a descoberta de fármacos	10 Anos de Biotecnologia no IPTSP (UFG)	Goiânia, GO
2018	Mesa-redonda	Mulheres na Ciência: Trajetórias em Química Computacional (Mesa-Redonda)	41ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química	Foz do Iguaçu, PR

Tabela 9 (Cont.) – Palestras em Eventos Científicos Nacionais (2010–2025).

Ano	Tipo	Título da Palestra	Evento	Local
2017	Seminário	Integrated Approaches for Drug Discovery for Parasitic and Emerging Diseases	Seminários do PPGBB — FIOCRUZ Paraná	Curitiba, PR
2017	Palestra convidada	Integrando os dois lados da Força: Estratégias Computacionais e Experimentais para a descoberta de fármacos	II Workshop de Jovens Pesquisadores em Planejamento de Fármacos — USP	São Paulo, SP
2017	Divulgação científica	Da Tuberculose à Zika: Potenciais tratamentos, vacinas e outros petiscos	Pint of Science Brazil	Goiânia, GO
2016	Seminário	Abordagens Computacionais para Dengue e Zika	Seminário sobre Arboviroses — UFBA	Salvador, BA
2016	Palestra convidada	Pesquisa em Química Medicinal Computacional no Brasil	Reunião Magna — Academia Brasileira de Ciências (ABC)	Rio de Janeiro, RJ
2016	Escola/Congresso	Modelagem Molecular Aplicada à Descoberta de Fármacos	VIII Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos	Petrópolis, RJ
2015	Palestra convidada	Descoberta de Fármacos Assistida por Computador	I Workshop de Jovens Pesquisadores em Química Farmacêutica — USP	São Paulo, SP
2015	Palestra convidada	Química Medicinal Computacional para Doenças Negligenciadas	IV Simpósio sobre Doenças Negligenciadas — USP	São Paulo, SP
2015	Congresso	Quimioinformática e Química Medicinal: Perspectivas	III Brazilian Colloquium on Medicinal Chemistry	Florianópolis, SC
2015	Congresso	Lessons and Challenges from a Young Medicinal Chemist Point of View	10th International Congress of Pharmaceutical Sciences CIFARP	Ribeirão Preto, SP
2013	Congresso	QSAR Multicomponente para Modelagem de Fármacos Multialvo	36ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (RASBQ)	Águas de Lindóia, SP

* Fonte: Lattes e RADOCS (2010–2025). Total: 43 palestras no Brasil.

III.3. PALESTRANTE EM EVENTOS CIENTÍFICOS INTERNACIONAIS

A disseminação do conhecimento produzido no LabMol para a comunidade científica internacional tem sido uma constante ao longo de minha carreira. Participei como palestrante convidada nos principais eventos da área, incluindo:

Ao longo de 16 anos de carreira na UFG (2010–2025), participei como palestrante convidada ou conferencista em mais de 30 eventos científicos

internacionais, presencialmente em 7 países (EUA, França, Espanha, Itália, África do Sul, Suécia, Alemanha) e virtualmente em eventos internacionais. Os principais destaques são: 240th ACS National Meeting (Boston, 2010); 244th ACS National Meeting (Philadelphia, 2012), onde recebi o Award Paper sobre Leishmania; 248th ACS National Meeting & Exposition (San Francisco, 2014), onde recebi o CINF Scholarship; International Workshop on New Approaches to Drug Discovery against Tropical Diseases (2016); 46th World Chemistry Congress / IUPAC (São Paulo, 2017); 1st International Conference of TWAS Young Affiliates Network — TYAN (2017); Missão científica na UNC Chapel Hill, EUA (set. 2017); L'Oréal-UNESCO For Women in Science 20th Anniversary, onde realizei uma TED Talk em Paris (mar. 2018); EFMC International Symposium on Medicinal Chemistry (virtual, ago. 2021); China-Brazil Young Scientist Webinar: R&D for Combating COVID-19 (virtual, nov. 2021); Missão — University of Cape Town, África do Sul (out. 2022); Missão — University of Gothenburg, Suécia (out. 2022); Society of Toxicology (SOT) Annual Meeting, EUA (mar. 2023); BRICS STI FP Conference (2023); Missão — Ersilia IO, Barcelona, Espanha (jun. 2023); Missão — University of Bonn, Alemanha (jun. 2023); Missão — Indiana University, EUA (ago. 2023); Congresso + Missão — UC San Diego, EUA (jun. 2024); Reunião Bienal da Real Sociedad Española de Química (RSEQ), Bilbao, Espanha (jun. 2025); CNS*2025 — International Conference, Florença, Itália (jul. 2025); 13th World Congress on Alternatives and Animal Use in the Life Sciences — 2 palestras (Rio de Janeiro, set. 2025); 3rd Meeting do Grupo de Trabalho Temporário em IA da OPCW — Única brasileira neste grupo de trabalho da Organização para a Proibição de Armas Químicas (set. 2025); BraGFoST 2025 — Brazilian-German Frontiers of Science and Technology Symposium, Alemanha (nov. 2025). A lista completa, com títulos das palestras e descrições, encontra-se na Tabela 10.

Tabela 10. Congressos, palestras e missões internacionais realizadas entre 2010 e 2025.

Ano	Tipo	Evento / Missão	Cidade / País	Título / Destaque
2025	Palestra convidada	Reunião Bienal da Real Sociedad Española de Química (RSEQ)	Bilbao, Espanha	'Mapping the Chemical Space of Odors: Analyzing Functional Groups and Molecular Scaffolds for Structure-Property Relationships' — missão exterior 27/06–09/07/2025
2025	Congresso	Computational Neuroscience (CNS 2025) Conference	Florença, Itália	Apresentação de pôster em congresso internacional (missão exterior 27/06–09/07/2025)
2025	Palestra convidada	13th World Congress on Alternatives and Animal Use in the Life Sciences	Rio de Janeiro, Brasil (Congresso Internacional)	'Application of New Approach Methods in the Safe and Sustainable Design of Innovative Products' — 02/09/2025
2025	Palestra convidada	13th World Congress on Alternatives and Animal Use in the Life Sciences	Rio de Janeiro, Brasil (Congresso Internacional)	'Machine Learning in Toxicology: Best Practices for Supervised Learning' — 03/09/2025

Tabela 10 (Cont.) – Congressos, palestras e missões internacionais realizadas entre 2010 e 2025.

Ano	Tipo	Evento / Missão	Cidade / País	Título / Destaque
2025	Palestra convidada	3rd Meeting TWG on AI — OPCW (Organisation for the Prohibition of Chemical Weapons)	Haia, Holanda	'Beyond the Screen: Integrating Multi-Method CADD to Accelerate Drug Discovery' — 18/09/2025. Única brasileira neste grupo de trabalho da OPCW
2025	Missão	BraGFoST 2025 — Brazilian-German Frontiers of Science and Technology Symposium	Mannheim, Alemanha	Comissão organizadora + Mediação da Sessão: 'Generative AI as a Catalyst for Innovation in Bioprospecting, Biotechnology, and Bioeconomy' — 10/11/2025 (missão 04–10/11/2025)
2024	Congresso + Missão	Congresso + Missão — UC San Diego	San Diego, EUA	Palestra de resultados + prospecção com Prof. Jair Lage Siqueira-Neto (jun/2024)
2024	Palestra convidada	2nd School of Cheminformatics in Latin America	México (Virtual)	“COVID-AI: COVID-AI: Enhancing Drug Discovery for COVID-19 Through AI - Insights from BRICS International Collaboration” (dez/2024)
2024	Palestra	ACS Fall Meeting 2024	Denver, EUA	Palestra “Advancing fragment screening strategies for targeted drug discovery in infectious diseases: insights from CRAFT” (ago/2024)
2023	Palestra	ACS Fall Meeting 2023	San Francisco, EUA	Palestra “An Intelligent Application for Accelerating Drug Discovery and Toxicity Research”
2023	Palestra convidada	LOLA 10 Years, DNDi	São Paulo, Brazil (evento internacional)	Palestra “Empowering Drug Discovery with Artificial Intelligence: Uncovering new Candidates for Neglected and Emerging Viral diseases”;
2023	Palestra convidada	Society of Toxicology (SOT) Annual Meeting	Nashville, EUA	Palestra “Best practices on supervised vs unsupervised learning approaches”;
2023	Missão	Missão de trabalho – Collaborations Pharmaceuticals	Raleigh, Carolina do Norte, EUA	Visita à Collaborations Pharmaceuticals (Dr. Sean Ekins), com apresentação de resultados do projeto BRICSS e prospecção de novos projetos (mar/2023)
2023	Palestra convidada	BRICS STI FP Conference	Internacional/Virtual	Apresentação: plataforma multicêntrica de IA para COVID-19 (2023)
2023	Missão	Ersilia IO	Barcelona, Espanha	Apresentação de resultados de projetos; prospecção com Dr. Miquel Duran-Frigola e Gemma Turon (jun/2023)
2023	Missão	University of Bonn	Bonn, Alemanha	Acompanhamento doutorado sanduíche Sabrina Mendonça + prospecção Prof. Jürgen Bajorath (jun/2023)
2023	Missão	Indiana University	Indianapolis, EUA	Prospecção de projetos com Profa. Laís da Silva (ago/2023)
2022	Palestra convidada	OpenTox Virtual Conference	Virtual, Internacional	Palestra em evento internacional “QSAR Applications to Toxicological Research and Risk Assessment”
2022	Palestra convidada	H3D Symposium	Stellenbosch, África do Sul	Palestra em evento “Artificial Intelligence for accelerating Drug Discovery for Neglected and Emerging Diseases”

Tabela 10 (Cont.) – Congressos, palestras e missões internacionais realizadas entre 2010 e 2025.

Ano	Tipo	Evento / Missão	Cidade / País	Título / Destaque
2022	Palestra convidada	School of Cheminformatics in Latin America	México (Virtual)	Palestra em evento virtual “Cheminformatics-driven Discovery of Hits for Neglected and Emerging Diseases” (nov/2022)
2022	Missão	University of Cape Town	Cape Town, África do Sul	Visita técnica ao H3D, apresentação de resultados BRICS-CNPq + prospecção com Prof. Kelly Chibale (out/2022)
2022	Missão	University of Gothenburg	Gothenburg, Suécia	Palestra projeto CAPES-STINT “Artificial intelligence and computer-assisted drug discovery for neglected tropical diseases”, acompanhamento doutorado sanduíche Bruna Souza + prospecção com Prof. Per Sunnerhagen (out/2022)
2021	Virtual	Science Forum South African (SFSA) 2021	Virtual (África do Sul)	Palestra: “Multidisciplinary platform based on artificial intelligence for accelerating drug discovery and repurposing for COVID-19”(dez/2021)
2021	Virtual	China-Brazil Young Scientist Webinar: R&D for Combating COVID-19	Virtual (China–Brasil)	Palestra: 'COVID-AI: AI platform for accelerating drug discovery and repurposing for COVID-19' (nov/2021)
2021	Virtual	International Symposium on Medicinal Chemistry — EFMC	Virtual (Europa)	Palestra: 'Artificial Intelligence for Emerging and Neglected Diseases Drug Discovery' (ago/2021)
2020	Palestra convidada	World Forum for Women in Science and 40 International Conference for Women in Science without borders	Rio de Janeiro, Brasil (Internacional)	Palestra apresentada no evento “Artificial Intelligence Platforms for Drug Discovery for Neglected Tropical Diseases”. Jan/2020
2018	Palestra convidada	L'Oréal-UNESCO For Women in Science 20th Anniversary	Paris, França	TED Talk como conferencista convidada para ~200 pessoas (pesquisadores, autoridades, imprensa) — mar/2018
2017	Congresso	46th World Chemistry Congress / IUPAC 49th General Assembly	São Paulo, BR, Internacional	Palestra: 'Development of in silico platforms for early prediction of toxicity properties'
2017	Palestra convidada	1st Intl Conference of TWAS Young Affiliates Network	Rio de Janeiro, BR, Internacional	Palestra: 'In silico platforms for prediction of toxicity properties of drug candidates and chemicals'
2017	Missão	Missão científica — University of North Carolina at Chapel Hill	Carolina do Norte, EUA	Resultados do projeto CNPq-PVE; com Profs. Tropsha e Muratov (set/2017), e prospecção com Dr. Sean Ekins
2016	Palestra convidada	International Workshop on New Approaches to Drug Discovery against Tropical Diseases	Internacional	Palestra: 'Computational platform for drug discovery of neglected diseases'
2015	Missão	Missão científica no Departamento de Ciencia e Tecnologia de Fármacos, Università di Torino	Turin, França	Palestra “Integrated Drug Design Approaches for Neglected Tropical Diseases”+ missão, prospecção com Profa. Donatella Boschi e Marco Lolli.
2015	Apresentação Oral	250th ACS National Meeting	Boston, EUA	Palestra: “Pred-hERG 2: An updated web-accessible computational tool for predicting cardiac toxicity”

Tabela 10 (Cont.) – Congressos, palestras e missões internacionais realizadas entre 2010 e 2025.

Ano	Tipo	Evento / Missão	Cidade / País	Título / Destaque
2015	Palestra convidada	International Rising Talents — L'Oréal-UNESCO	Paris, França	Selecionada como uma das 15 jovens cientistas em destaque internacional – International Rising Talents — L'Oréal-UNESCO For Women in Science
2014	Congresso	248th ACS National Meeting & Exposition	San Francisco, EUA	Apresentação de trabalhos + prêmio CINF Scholarship for Scientific Excellence (Royal Society of Chemistry / ACS)
2012	Congresso	244th ACS National Meeting	Philadelphia, EUA	Award Paper — 'Integrated chemoinformatics approaches to virtual screening in the search of new lead compounds against Leishmania'
2010	Congresso	240th ACS National Meeting	Boston, EUA	Apresentação oral: 'Discovery of novel hit compounds for T. cruzi sterol 14 α -demethylase through structure-based virtual screening'

IV. ADMINISTRATIVA

IV - ATIVIDADES ADMINISTRATIVAS E DE REPRESENTAÇÃO

A gestão acadêmica é uma responsabilidade que assumi com dedicação ao longo de toda a minha carreira, compreendendo que o fortalecimento das instituições é parte indissociável do trabalho do professor universitário.

Na Faculdade de Farmácia da UFG, fui eleita vice-coordenadora na gestão 2023–2025, ao lado da Profa. Dra. Stephânia Fleury Taveira, colega e amiga de longa data. Como ela se encontrava em licença-maternidade no início do mandato, assumi o cargo de Coordenadora *Pró-Tempore* do Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas (PPGCF-UFG) por três meses em 2023, dando continuidade como Vice-Coordenadora até 2025. Nesse período, o PPGCF passou por significativas transformações institucionais, que culminaram na elevação da nota CAPES para 5 na última avaliação quadrienal (2025). Em conjunto com a Profa. Stephânia e demais membros da Comissão Administrativa, empenhamo-nos na profissionalização do Programa: revisamos e organizamos todas as normativas vigentes e elaboramos o novo regimento do PPGCF-UFG, em atendimento à atualização do Regimento Geral dos Programas de Pós-Graduação da UFG.

Além disso, exerci os seguintes cargos e funções institucionais:

- ⇒ Membro da Comissão de Pesquisa da Faculdade de Farmácia, UFG, múltiplos mandatos.
- ⇒ Participação em diversas comissões e comitês institucionais, incluindo comissões do CNPq, como PIBIC entre outras.
- ⇒ Membro do Comitê de Ética no Uso de Animais (CEUA) na Universidade Federal de Goiás, de 2011-2014.
- ⇒ Membro do Comitê Interno de Avaliação de Iniciação Científica (PIBIC-UFG), mandato 2012–2013, conforme Portaria PRPPG n.º 2858, de 02/04/2012.
- ⇒ Membro de banca de concurso público para Professor Efetivo na área de Química Farmacêutica — Universidade Estadual de Feira de Santana (UEFS), realizado em 18–20 de outubro de 2011.

Na Sociedade Brasileira de Química (SBQ), exerci liderança progressiva na Divisão de Química Medicinal: fui eleita Tesoureira (2014–2016), Vice-Diretora (2016–2018) e Diretora (2018–2020). Esse ciclo de representação culminou na

organização do maior evento de Química Medicinal da América Latina, o BrazMedChem 2019. Em seguida, concorri e fui eleita Tesoureira Adjunta da Diretoria e Conselho da SBQ na gestão 2020–2022, cargo em que acompanhei de perto a gestão financeira da Sociedade ao lado do Prof. Fernando Carvalho (UFF), então Tesoureiro. As reuniões mensais da Diretoria foram também uma valiosa oportunidade de convivência e aprendizado com referências da Química nacional, como o Prof. Romeu Rocha (UFSCar), presidente da SBQ naquele período. Encerrado o mandato, afastei-me temporariamente das atividades na SBQ devido à questões pessoais, com o nascimento do meu segundo filho; hoje, avalio com entusiasmo a possibilidade de retomar essa atuação.

Minha atuação editorial em periódicos de alto impacto reflete o reconhecimento da comunidade científica internacional: fui editora associada da revista *Communications Chemistry* (Nature/Springer, 2020–2022) da *Artificial Intelligence in the Life Sciences* (Elsevier, 2021–2022), e da ACS Omega (American Chemical Society, Qualis A1, 2023–2025). Atualmente, sirvo como Editora Sênior dessa mesma revista desde 2025. Integro ainda o corpo editorial (EAB, *Editorial Advisory Board*) de revistas de alto impacto da minha área de pesquisa, como o *Journal of Medicinal Chemistry* (ACS, Qualis A1), *ACS Medicinal Chemistry Letters* (ACS, Qualis A1), *Journal of Chemical Information and Modelling* (ACS, Qualis A1), e *ChemMedChem* (Wiley, Qualis A2). Atuo como revisora de agências de fomento nacionais (FAPESP, FAPEMIG, CNPq) e internacionais (ANR da França, SNF da Suíça e VR da Suécia).

V. QUALIFICAÇÃO

V. QUALIFICAÇÃO, RECONHECIMENTOS E PREMIAÇÕES

"Não basta ter um sonho, é preciso construí-lo diariamente, com cada escolha, cada orientação, cada artigo, cada aula."
Carolina Horta Andrade

Ao longo da carreira, recebi uma série de prêmios e distinções que refletem o reconhecimento da comunidade científica nacional e internacional pela qualidade e pelo impacto da pesquisa desenvolvida no LabMol.

Entre os reconhecimentos que mais marcaram minha trajetória, quatro merecem destaque especial por sua dimensão simbólica, sua seletividade e pelo que representam para a visibilidade da ciência brasileira e das mulheres na pesquisa.

O Prêmio Para Mulheres na Ciência — L'Oréal, ABC e UNESCO (2014), conquistado na área de Ciências Químicas, é o mais prestigioso reconhecimento nacional destinado a pesquisadoras brasileiras. Concedido anualmente pela Fundação L'Oréal em parceria com a Academia Brasileira de Ciências (ABC) e a UNESCO, o prêmio contempla oito pesquisadoras brasileiras por ano, distribuídas entre as grandes áreas do conhecimento, com uma bolsa de R\$ 50 mil e treinamentos de liderança. Recebi esse reconhecimento quando ainda contava com apenas quatro anos de carreira na UFG, em 2014, três anos após minha posse como professora, o que evidencia a velocidade e a solidez com que o meu grupo se estabeleceu no cenário nacional. Fui a primeira pesquisadora do Estado de Goiás a receber esta distinção. O prêmio reconhecia, naquele momento, minha atuação pioneira no desenvolvimento de plataformas computacionais para a descoberta de fármacos para doenças negligenciadas, em especial, para a Leishmaniose, linhas que se tornariam, nos anos seguintes, referências internacionais na área.

A premiação de 2014 abriu caminho para um reconhecimento ainda mais raro: em 2015, fui selecionada como uma das 15 *International Rising Talents* pelo programa L'Oréal-UNESCO *For Women in Science*. Este programa internacional seleciona, anualmente, apenas quinze jovens cientistas em todo o mundo, a partir do conjunto de todas as laureadas nacionais dos 117 países participantes do programa, sendo três de cada continente, que demonstrem potencial excepcional para transformar o panorama científico global. Ser uma das quinze escolhidas em âmbito mundial, e a única brasileira em 2015, representou uma validação inequívoca da relevância internacional da pesquisa conduzida no LabMol-UFG. A distinção foi entregue em cerimônia de grande prestígio e visibilidade na *Sorbonne Université*, em Paris em 2015, além

de uma seção científica na sede da UNESCO, momentos que ficarão para sempre na minha memória. Durante aquela semana de imersão com as demais laureadas, participamos de treinamentos e rodas de conversa com cientistas extraordinárias, algumas delas ganhadoras do Prêmio Nobel. Tive, pela primeira vez com essa intensidade, a dimensão real do que é a fronteira da ciência mundial, e a certeza visceral de que nada se constrói sozinho: precisamos colaborar para avançar. O *International Rising Talents* projetou o LabMol e a Universidade Federal de Goiás em um circuito de visibilidade científica global que raramente é alcançado por pesquisadores de instituições fora do eixo Rio-São Paulo, e sinalizou ao mundo que ciência de excelência se faz também, e com orgulho, no cerrado brasileiro!

Em 2018 nasceu minha primeira filha, Manuela, e em 2021, meu segundo filho, Gabriel. A chegada deles foi, sem dúvida, a melhor coisa que já me aconteceu. Mas a maternidade também trouxe consigo um medo que não me envergonha confessar: o de não conseguir manter o ritmo de crescimento da minha carreira científica. Essa tensão entre maternidade e produtividade acadêmica é real, estrutural, pouco discutida e muito mais comum do que se imagina entre pesquisadoras, especialmente em áreas de ciência e tecnologia, historicamente masculinas. Por isso, quando em 2022 recebi o Prêmio Mulheres Brasileiras na Química - Categoria Líder Emergente, concedido conjuntamente pela *American Chemical Society* (ACS) e pela Sociedade Brasileira de Química (SBQ), o significado foi muito além do reconhecimento científico em si. Era uma resposta silenciosa e poderosa a todas aquelas dúvidas: sim, é possível ser mãe e ser pesquisadora de impacto internacional, ao mesmo tempo. Criado para reconhecer pesquisadoras brasileiras que estão moldando o futuro da química e liderando novas gerações de cientistas, o prêmio na categoria 'Líder Emergente' contempla docentes em plena fase de consolidação de liderança científica, exatamente o momento em que o LabMol vivia sua expansão mais intensa, com a integração ao CEIA e a multiplicação de colaborações internacionais. Este reconhecimento conjunto de ACS e SBQ, a maior e a principal sociedade de química do mundo e do Brasil, respectivamente, reafirmou minha posição de referência na Química Medicinal computacional e, mais do que isso, expressou um valor que carrego como compromisso: quem lidera com excelência tem também a responsabilidade de abrir caminhos para as que vêm depois.

Reconhecimentos igualmente significativos derivam da excelência formativa do LabMol, traduzida em prêmios internacionais e nacionais concedidos a orientandos pelo trabalho desenvolvido no grupo. O caso mais emblemático foi o de Vinícius de Medeiros Alves, que percorreu no LabMol a trajetória completa: iniciação científica, mestrado e doutorado, e cujos trabalhos sobre o Pred-Skin (plataforma computacional para predição de sensibilização cutânea, alternativa ao teste animal) foram reconhecidos com dois dos prêmios mais prestigiosos em sua área: o *Lush Prize — Young*

Researcher Award (2018), concedido pela empresa britânica Lush Cosmetics em parceria com a Ethical Consumer, entregue em cerimônia em Londres e disputado por cientistas de todo o mundo dedicados ao desenvolvimento de métodos alternativos ao uso de animais em pesquisa (entre 17 projetos premiados de 9 países, o Pred-Skin foi o único brasileiro); e o Prêmio CAPES/Natura Campus de Excelência em Pesquisa — 3ª edição (2020), concedido pelo Ministério da Educação em parceria com a Natura, com premiação de R\$ 25.000, reconhecendo o Pred-Skin como um dos trabalhos de pós-graduação de maior excelência e impacto do país. Que um trabalho desenvolvido integralmente no cerrado goiano tenha vencido um prêmio internacional britânico de alternativas ao uso de animais, e logo em seguida o principal prêmio nacional de excelência em pesquisa de pós-graduação, é uma síntese do que o LabMol construiu em pouco mais de uma década: ciência de fronteira com impacto real, feita em Goiás! Além disso, tenho a honra de ter orientado outro vencedor do Prêmio Destaque na Iniciação Científica e Tecnológica do CNPq, o mais alto reconhecimento nacional concedido a trabalhos de iniciação científica no Brasil: Francisco Lucas de Oliveira, premiado na 21ª edição (2024), pelo trabalho desenvolvido no âmbito do desenvolvimento do Cyto-Safe, uma plataforma baseada em IA para predição de citotoxicidade de compostos químicos. Ser orientadora de estudantes contemplados com os maiores prêmios nacionais e internacionais de formação científica posiciona o LabMol entre os ambientes de mentoria mais impactantes do Brasil na área de Química Medicinal e Quimioinformática.

Além desses quatro destaques, a trajetória de reconhecimentos inclui distinções igualmente expressivas: a eleição como Membro Afiliado da Academia Brasileira de Ciências (ABC) em 2016, sendo a primeira mulher cientista do Estado de Goiás a receber este título; a eleição para a *Global Young Academy* (GYA, 2021–2025), academia que reúne 200 dos mais promissores jovens cientistas do mundo; o *Early Career MedChemist Award* da Divisão de Química Medicinal da SBQ (2023), concedido a pesquisadores de até 45 anos com contribuições de destaque para a área; a *Condecoração Cavaliere dell'Ordine della Stella d'Italia* (Cavaleiro da Ordem da Estrela da Itália, 2024), distinção conferida pelo governo italiano a estrangeiros que promovem relações com a Itália, no meu caso, por meio das colaborações científicas com grupos italianos e pela formação de pesquisadores com passagem por universidades italianas; e o Prêmio Goiano de Ciência, Tecnologia e Inovação, na categoria Pesquisador Destaque (FAPEG, 2025), o mais importante prêmio científico do Estado de Goiás, concedido pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Goiás. Também em 2025, o trabalho apresentado no *13th World Congress on Alternatives and Animal Use in the Life Sciences* (WC13) recebeu o *Natura Campus Award*, reconhecendo a contribuição do LabMol ao desenvolvimento de métodos alternativos ao uso de animais em pesquisa, uma pauta crescentemente relevante para a comunidade científica global.

Abaixo, destaco todos os prêmios recebidos, em ordem cronológica:

2025 Prêmio Goiano de Ciência, Tecnologia e Inovação — Pesquisador Destaque, FAPEG e Secretaria de Ciência, Tecnologia e Inovação do Estado de Goiás.

2025 Top 2% Cientistas Mais Influentes do Mundo em sua Área do Conhecimento, Química Medicinal e Biomolecular, pelo *ranking* da Elsevier/Universidade de Stanford, pelo terceiro ano consecutivo, sendo a única mulher da UFG a compor essa lista.

2025 Entrevista de destaque — '*Women in Chemistry: Q&A with Professor Carolina Horta Andrade*', publicada na revista Communications Chemistry (Nature Portfolio, fator de impacto 5.9), em 22 de fevereiro de 2025 (doi: 10.1038/s42004-025-01452-y). A seleção pela editoria da revista para integrar a série 'Women in Chemistry' representa um reconhecimento pela liderança científica e pelo compromisso com a promoção de mulheres na ciência em âmbito internacional.

2025 Melhor Trabalho Apresentado no 13th World Congress on Alternatives and Animal Use in the Life Sciences — Natura Campus Awards.

2024 Top 2% Cientistas Mais Influentes do Mundo em sua Área do Conhecimento — Elsevier/Universidade de Stanford.

2024 Condecoração Cavaleiro da Ordem da Estrela da Itália (*Ordine della Stella d'Italia*) — Embaixada da Itália no Brasil.

2024 21º Prêmio Destaque na Iniciação Científica e Tecnológica — CNPq (trabalho orientado).

2023 Early Career MedChemist Award — Divisão de Química Medicinal, Sociedade Brasileira de Química (SBQ).

2023 Top 2% Cientistas Mais Influentes do Mundo em sua Área do Conhecimento — Elsevier/Universidade de Stanford.

2022 Prêmio Mulheres Brasileiras na Química — Categoria Líder Emergente, American Chemical Society (ACS) e SBQ.

2022 IX Prêmio SBPC/GO de Popularização da Ciência 2022 — SBPC Regional Goiás, para a minha orientanda de mestrado Luiza Vieira da Cruz,

pelo trabalho sobre uso de IA para desenvolvimento de fármacos contra a COVID-19.

2021 Eleita Membro da Global Young Academy (GYA) — Academia Global de Jovens Pesquisadores (mandato 2021–2025).

2020 Prêmio CAPES/Natura Campus de Excelência em Pesquisa — 3ª edição (orientando Vinícius M. Alves). Trabalho: Pred-Skin — plataforma computacional para predição de sensibilização cutânea como alternativa ao teste animal LLNA. Premiação de R\$ 25.000, Ministério da Educação / Natura.

2019 ChemMedChem Poster Prize — 9th Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry.

2019 CINF Scholarship for Scientific Excellence — Division of Chemical Information, American Chemical Society.

2018 Lush Prize — Young Researcher Award (orientando Vinícius M. Alves). Trabalho: Pred-Skin (predição de sensibilização cutânea). Prêmio internacional da Lush Cosmetics (Reino Unido) em parceria com a Ethical Consumer, concedido a 17 projetos de 9 países dedicados ao desenvolvimento de métodos alternativos ao uso de animais. Único projeto brasileiro premiado na edição de 2018.

2016 Eleita Membro Afiliado da Academia Brasileira de Ciências (ABC), mandato 2016–2021 — sendo a primeira mulher cientista do Estado de Goiás a receber esta distinção.

2015 International Rising Talents — L'Oréal-UNESCO (jovem cientista em destaque internacional).

2015 Menção Honrosa pelo Reconhecimento à Pesquisa — CONSUNI-UFG.

2014 Prêmio Para Mulheres na Ciência — área de Ciências Químicas, L'Oréal, ABC e UNESCO.

2014 CINF Scholarship for Scientific Excellence — Division of Chemical Information, American Chemical Society.

2013 Melhor Trabalho — XII Encontro Nacional de Professores de Química Farmacêutica (XII ENPQF), Goiânia, GO, 01 de março de 2013. Trabalho: 'Análise de interação com o sítio ativo: complementaridade, potência e resistência'.

2013 Prêmio de Melhor Trabalho — III Symposium on Drug Design for Neglected Diseases (III DDND), São Paulo, SP, 23 de outubro de 2013.

Trabalho: 'Integrated Chemoinformatics Approach to Search New Anti-Malarial Drugs'.

2012 Menção Honrosa pelo Reconhecimento à Pesquisa — CONSUNI-UFG.

2012 Trabalho premiado (Award Paper) — 244th ACS National Meeting & Exposition, Philadelphia, PA, EUA. Trabalho: 'Integrated chemoinformatics approaches to virtual screening in the search of new lead compounds against Leishmania'.

2012 CINF Scholarship for Scientific Excellence — Division of Chemical Information, American Chemical Society.

Esses prêmios expressam não apenas um reconhecimento individual, mas o êxito coletivo de toda a equipe do LabMol: dos estudantes que se dedicaram com afinco e foram protagonistas de cada conquista, e dos colaboradores e parceiros que tornaram possível essa trajetória científica.

VI. CONSIDERAÇÕES FINAIS

VI. CONSIDERAÇÕES FINAIS

“Girassóis não precisam de explicação para se voltar à luz: é simplesmente o que fazem. Ao longo desses dezesseis anos de trajetória na UFG, hoje reconheço em mim esse mesmo movimento, não como estratégia, mas como necessidade. A ciência, para mim, sempre foi o lado para onde o dia nasce. Sempre fui movida pela paixão a cada descoberta. Cada molécula planejada, cada modelo construído, cada trabalho publicado, cada orientando que partiu para o seu próprio horizonte representa um giro em direção ao que ainda não se conhece, ao que ainda não se cura, ao que ainda não se compreende. O LabMol nasceu dessa postura: a de quem não espera que a luz chegue, mas se move ativamente em sua direção, e tenta ensinar outros a fazer o mesmo.”

Carolina Horta Andrade

Ao concluir este memorial, revisito uma trajetória de dezesseis anos na Faculdade de Farmácia da UFG com um sentimento profundo de gratidão e responsabilidade. Cheguei à UFG em 2010 com 27 anos, como uma jovem pesquisadora recém-doutora, com ideias ambiciosas sobre o que a quimioinformática poderia fazer pela saúde pública brasileira. Hoje, com 42 anos e com o LabMol consolidado como referência internacional, com dezenas de estudantes formados e com uma produção científica de alto impacto, posso afirmar que o sonho se tornou realidade, não sozinha, mas em parceria com uma comunidade extraordinária de alunos e pesquisadores parceiros.

A Química Medicinal Computacional e a Inteligência Artificial estão transformando de forma irreversível o paradigma da descoberta de fármacos. Algoritmos que antes demoravam para identificar candidatos promissores hoje operam em horas. Modelos preditivos de toxicidade estão substituindo e complementando os testes em animais, tornando a ciência mais ética e mais humana. O Brasil tem tudo para ser protagonista nessa revolução, e é nessa direção que oriento meu trabalho.

Ao longo desta trajetória, aprendi que a excelência científica e o compromisso social não são opostos: são complementares. Pesquisar doenças negligenciadas, formar jovens cientistas de regiões historicamente sub-representadas, lutar pela presença de mulheres na ciência e desenvolver ferramentas abertas e acessíveis são, para mim, expressões concretas do que significa ser professora titular em uma universidade pública brasileira.

Agradeço a cada aluno que confiou em mim seus anos de formação. Agradeço aos colegas da Faculdade de Farmácia da UFG pelo ambiente intelectual estimulante e pelo apoio genuíno. Agradeço às agências nacionais de fomento: CNPq, FAPEG, CAPES e FAPESP, que acreditaram e investiram nesta ciência. Agradeço, especialmente, à minha família, que suportou com amor as ausências e as exigências desta carreira.

Assumo a progressão à classe de Professor Titular não como um ponto de chegada, mas como um novo patamar de responsabilidade. Os melhores projetos ainda estão por vir: novas plataformas de IA, novos candidatos a fármacos, novas gerações de pesquisadores. O LabMol segue em movimento. E eu, com ele.

Carolina Horta Andrade

Goiânia - GO, 03 de Julho de 2026.