

## **Proposta de abertura de uma vaga MS-3 na área de Modelagem da Resposta Molecular à Radiação Eletromagnética**

### **Justificativa:**

O tema de Modelagem da Resposta Molecular à Radiação Eletromagnética, sugerido para um concurso público no IFUSP, tem caráter estratégico por refletir tendências internacionais de investimento em áreas relacionadas a sistemas biológicos e bioinspirados, energias renováveis, problemas climáticos e saúde humana. Trata-se de um tema teórico interdisciplinar, na interface entre Física, Química, Ciência de Materiais e Biologia, que abrange tópicos importantes como fotossíntese natural e artificial, dispositivos fotovoltaicos orgânicos, armazenamento, dissipação e transformação de energia, efeito estufa, transformação de poluentes na atmosfera, carcinogênese, e terapia fotodinâmica do câncer. Embora variados sistemas possam ser considerados, a proposta se volta a moléculas, biomoléculas e materiais moleculares. Estes materiais são caracterizados pela relevância de processos que ocorrem em escala molecular às suas propriedades, valendo mencionar a absorção, emissão e espalhamento de luz, formação de agregados, transporte excitônico de carga e energia, bem como recombinação excitônica mediada por mecanismos tipicamente moleculares, tais como acoplamentos não adiabáticos entre estados excitados, conversões internas e cruzamentos inter-sistemas. A importância da modelagem molecular decorre da possibilidade de relacionar propriedades e aplicações à estrutura molecular, interações intermoleculares, bem como à energia e dinâmica dos estados eletronicamente excitados.

Embora as subáreas mencionadas apresentem especificidades, seu estudo compartilha tanto a fenomenologia característica dos processos moleculares quanto um amplo conjunto de métodos computacionais modernos, que por si constituem uma área de investigação em constante desenvolvimento, alicerçada nos princípios fundamentais da Mecânica Quântica, Mecânica Estatística e Mecânica Clássica. No que toca a fenomenologia, podemos mencionar, como exemplo representativo, a transferência eletrônica a partir de estados moleculares excitados, que permeia a fotossíntese, fotovoltaica orgânica e mecanismos de ação de moléculas fotossensibilizadoras empregadas no tratamento do câncer. Já os métodos computacionais se prestam à descrição de estados moleculares excitados, dinâmica nuclear adiabática e não adiabática, interação do sistema com o ambiente, e mais recentemente técnicas de aprendizagem automática para aumento de eficiência ou análise de resultados. Finalmente, as simulações computacionais abrangem diferentes escalas temporais e espaciais, desde o tratamento atomístico de moléculas e sistemas manométricos até tratamentos *coarse grained* de sistemas micrométricos. É fato notável que esses métodos computacionais tenham recebido dois Prêmios Nobel de Química na últimas décadas. Walter Kohn e John Pople dividiram o prêmio em 1998, pelo desenvolvimento de métodos de Estrutura Eletrônica, enquanto Martin Karplus, Michael Levitt e Arieh Warshel foram laureados em 2013 pelo desenvolvimento de Métodos Híbridos QM/MM para tratamento de sistemas complexos.

Um/a jovem pesquisador/a que atue em alguma(s) dessa(s) subáreas, com domínio dos métodos computacionais e cultura sobre fenômenos moleculares, poderá

vir a ser um quadro importante do IFUSP, contribuindo para o Projeto Acadêmico, por variadas razões:

**1) Integração e complementaridade.** O grupo de Física Molecular e Modelagem, composto pelo Prof. Sylvio Canuto (Titular), Prof. Kaline Coutinho (Titular) e Prof. Marcio Varella (Associado) atua em subáreas correlatas às elencadas acima, todavia sem sobreposição significativa. Haverá também interface e complementaridade com outros grupos de pesquisa do IFUSP, ou mesmo em outras Unidades da USP, dedicados a Biosistemas, Física Atmosférica, Medicina e Ciência de Materiais. O intento é prospectar um/a profissional independente e com perfil de liderança, porém capaz de interagir com os grupos de pesquisa já existentes na Universidade, que oferecerá ambiente favorável para integração a esforços multidisciplinares. Cabe mencionar, finalmente, que o IFUSP não conta com pesquisadores que atuem continuada e destacadamente nas importantes subáreas supracitadas. Em geral, o Brasil tem atividade importante em linhas de pesquisa mais tradicionais da Física do Estado Sólido – tais como semicondutores, materiais magnéticos, sistemas fortemente correlacionados e isolantes topológicos – mas grupos de pesquisa na interface entre Física Atômica e Molecular, Biologia/Medicina, Física Atmosférica e Ciência de Materiais são mais raros.

**2) Polivalência e longevidade acadêmica.** Como delineado acima, um/a jovem bem formado, com cultura abrangente no campo das Ciências Moleculares e métodos computacionais pertinentes, terá certa facilidade de migração entre as subáreas correlatas. Essa polivalência poderá vir a pavimentar colaborações, mas também possibilitar a atuação do/a Pesquisador/a em novas linhas de investigação e aplicações que venham a ser propostas. Não se deve deixar de apreciar que as Ciências Moleculares se beneficiam do arsenal de técnicas da Síntese Orgânica, que conferem variabilidade e possibilidades essencialmente ilimitadas, não raro a baixo custo. Nessa medida, o/a Pesquisador/a terá grande potencial para exercer uma liderança longa, também favorecida pelas áreas estratégicas nas quais a proposta se insere, tais como meio ambiente, energia e tratamento do câncer.

**3) Impacto e relevância.** A interação entre moléculas e radiação eletromagnética é relevante a diferentes áreas do conhecimento, tais como processos fundamentais em moléculas isoladas (Fotoquímica/Fotofísica), estágios pré-bióticos da Evolução (Evolução Química), carcinogênese e terapias do câncer, além da coleta de luz (*light harvesting*). Cabe mencionar que coleta de luz é um termo amplo que abarca fotossíntese artificial, fotovoltaica e fotocatalise. A fotossíntese artificial diz respeito à utilização da luz solar para produção de espécies com alto valor agregado e energético. Vale destacar a obtenção de hidrogênio a partir da água (*water splitting*) e a redução eletroquímica do gás carbônico [1], bem como a relevância de catalisadores moleculares [2] para esses processos. A fotovoltaica orgânica diz respeito à fabricação de fotocélulas baseadas em materiais moleculares, em oposição aos semicondutores tradicionais. Embora a fotoconversão seja menos eficiente nos dispositivos orgânicos, seu baixo custo de produção (econômico e energético), facilidade de transporte (materiais leves) e descarte (não utilizam metais pesados) pode torná-los viáveis tecnológica e economicamente [3]. Novos materiais têm permitido aumento significativo de eficiência em anos recentes [4], e pequenas moléculas estão entre os materiais mais promissores [5]. Por sua vez, a terapia fotodinâmica abrange tratamentos não invasivos de doenças não oncológicas e

variados tipos de câncer [6], e se baseia na introdução de fármacos denominados fotossensibilizadores nos tecidos afetados. A interação dessas espécies com a luz inicia reações que resultam na eliminação das células indesejadas (tumoriais). É interessante mencionar que os mecanismos moleculares subjacentes à terapia envolvem a produção de espécies reativas de oxigênio (*oxygen reactive species*, ROS) [7]. As ROS também estão associadas ao stress oxidativo e carcinogênese (câncer de pele em especial), sendo produzidas pela interação de biomoléculas com a radiação solar [8].

Todas as subáreas mencionadas têm atividade intensa e divulgada em periódicos de alto prestígio, incluindo as revistas do grupo *Nature*, PNAS, bem como publicações de alto impacto sobre biomedicina e materiais. A Tabela I mostra resultados de buscas realizadas sobre tópicos na base de dados *Web of Science*, compreendendo o período 2015-2022, apontando o número (i) de artigos publicados, (ii) de artigos de revisão, e (iii) de artigos altamente citados. As buscas contemplaram os tópicos *photodynamic therapy* e *light harvesting*, bem como os tópicos mais específicos *artificial photosynthesis* e *organic photovoltaics*, sendo a evolução do número total de publicações mostrada na Figura 1. Embora a brevíssima explanação sobre a área de pesquisa e os dados cientométricos ofereçam um painel limitado, deve estar claro que a proposta de contratar um/a pesquisador/a que trabalhe com simulação computacional da interação entre moléculas e radiação não ionizante contempla linhas de pesquisa relevantes, atuais e com intensa produção científica.

**4) Expectativa de boa contratação.** As linhas de investigação mencionadas estão presentes em departamentos de (Bio)Física, (Bio)Química e Ciência de Materiais de diversos países, certamente incluindo os Estados Unidos, América Latina, Europa Ocidental e China. Como o Brasil tem boa tradição em simulações computacionais nessas grandes áreas, um número expressivo de recém-doutores busca experiência pós-doutoral naqueles países, em áreas contempladas nesta proposta. Embora um estudo sistemático não tenha sido conduzido, os membros do Grupo de Física Molecular e Modelagem, baseados em sua rede de colaboradores e reconhecida inserção internacional, acreditam haver número considerável de jovens pesquisadores com o perfil aqui proposto, brasileiros e estrangeiros, e portanto de potenciais fortes candidatas/as à contratação no IFUSP.

**Tabela I:** Número de artigos publicados (AP), número de artigos de revisão (AR), e número de artigos com alto número de citações (AC) nas áreas de Terapia Fotodinâmica (TPD) e Coleta de Luz (COL), bem como nas subáreas Fotossíntese Artificial (FSA), e Fotovoltaica Orgânica (FVO). A pesquisa foi realizada na plataforma *Web of Science* utilizando a busca avançada por tópico, restrita ao período 2015-2022.

Área	AP	AR	AC
TPD <sup>(a)</sup>	5015	480	123
COL <sup>(b)</sup>	9614	885	282
FSA <sup>(c)</sup>	2432	556	177
FVO <sup>(d)</sup>	3239	345	120

(a) Busca por tópico: TS=("photodynamic therapy") AND TS=("photosensitizer")

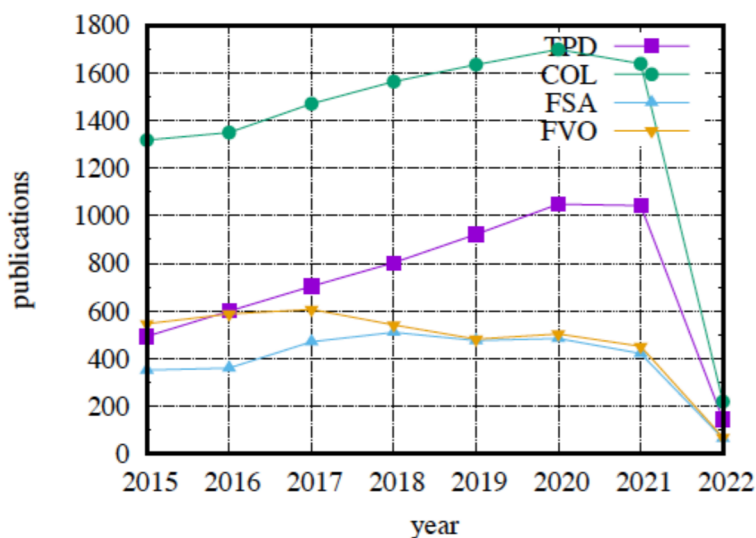
(b) Busca por tópico: TS=("light harvesting")

(c) Busca por tópico: TS=("artificial photosynthesis")

(d) Busca por tópico: TS=("Organic photovoltaics")

### Sugestão de departamento:

O Departamento de Física Geral (FGE) é uma boa escolha para acolher um novo pesquisador na área de Modelagem da Resposta Molecular à Radiação Eletromagnética. Além de abrigar o Grupo de Física Molecular e Modelagem, o FGE conta com a presença de grupos de pesquisa interessados em biosistemas e aplicações biomédicas, sendo possível destacar a Prof. Teresa Lamy (Titular), o Prof. Adriano Alencar (Titular) e o Prof. Leandro Barbosa (Associado).



**Figura 1:** Número total de publicações (*results*), não restritas a artigos, nas áreas definidas na Tabela I, utilizando os mesmos termos e período de pesquisa.

### Sugestão de disciplinas:

- 4302211 - Física III
- 4302403 - Mecânica Quântica I
- 4300315 - Introdução à Física Atômica e Molecular

### Referências:

- [1] D. Kim et al., *Angewandte Chemie International Edition*, **54**, 3259 (2015).
- [2] B. B. Zhang, L. C. Sun, *Chemical Society Reviews* **48**, 2216 (2019).
- [3] M. Riede et al., *Advanced Energy Materials* **11**, 2002653 (2021).
- [4] B. Coropceanu, *Nature Reviews Materials* **4**, 689 (2019).
- [5] A. Armin et al., *Advanced Energy Materials* **11**, 2003570 (2021).
- [6] S. Kwiatkowski et al., *Biomedicine & Pharmacotherapy* **106**, 1098 (2018).
- [7] Z. J. Zhou et al., *Chemical Society Reviews* **45**, 6597 (2016).
- [8] J. Cadet, T. Douki, *Photochemical & Photobiological Sciences* **17**, 1816 (2018).