

41^a



**Reunião Anual
Sociedade Brasileira de Química**



CONSTRUINDO O AMANHÃ

de 21 a 24/05/2018

Foz do Iguaçu, PR



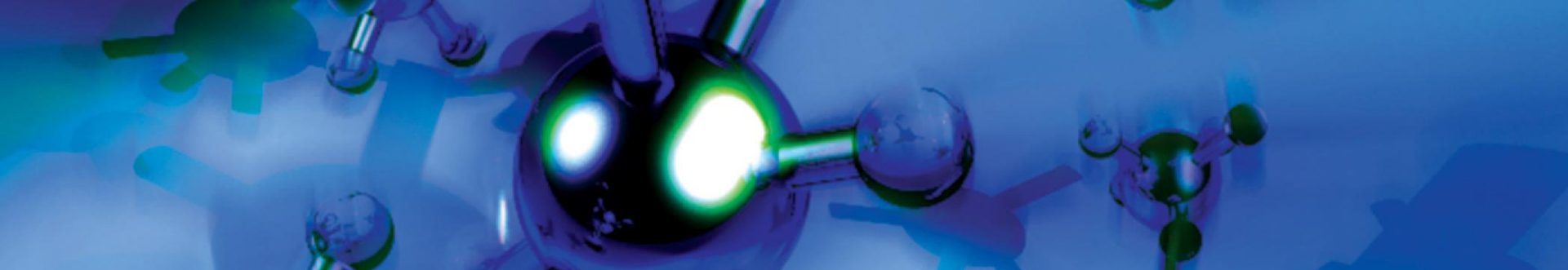
Realização:

Sociedade Brasileira de Química

XVI Workshop de Pós-Graduação em Química

Simpósio 2

Perspectivas dos PPGQ e inserção dos futuros profissionais/Cenários futuros para a formação do pós-graduando.



Simpósio 2: Perspectivas dos PPGQ e inserção dos futuros profissionais/Cenários futuros para a formação do pós-graduando.

Coordenadora: Maria Vargas

14:10 – 14:25 Maria Vargas (UFF): Cenários futuros da Química e a formação do nosso pós-graduando.

14:25 – 14:40 Adriano Monteiro (UFRGS): Egressos da química. Quantos são e onde estão trabalhando, remuneração e mobilidade.

14:40 - 14:55 Norberto Peporine (USP-RP): Inovação e o momento de crise brasileira.



Cenários futuros da Química e a formação do pós-graduando.

Maria Vargas (UFF)



Como vão mudar os empregos nas ciências?
Que foco dar ao desenvolvimento profissional?

**VELOCIDADE DAS
MUDANÇAS
TECNOLÓGICAS**

MUDANÇAS DRÁSTICAS – influências?

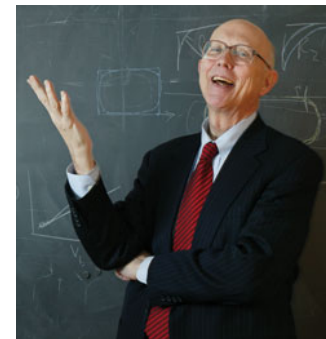
- nos tipos de produtos e serviços que químicos prestam;
- nas ferramentas e métodos por eles usados.

QUÍMICOS: é importante entender:

- como as mudanças vão afetar suas carreiras;
- que habilidades/qualificações estas mudanças irão demandar?
- que oportunidades estas mudanças trarão?

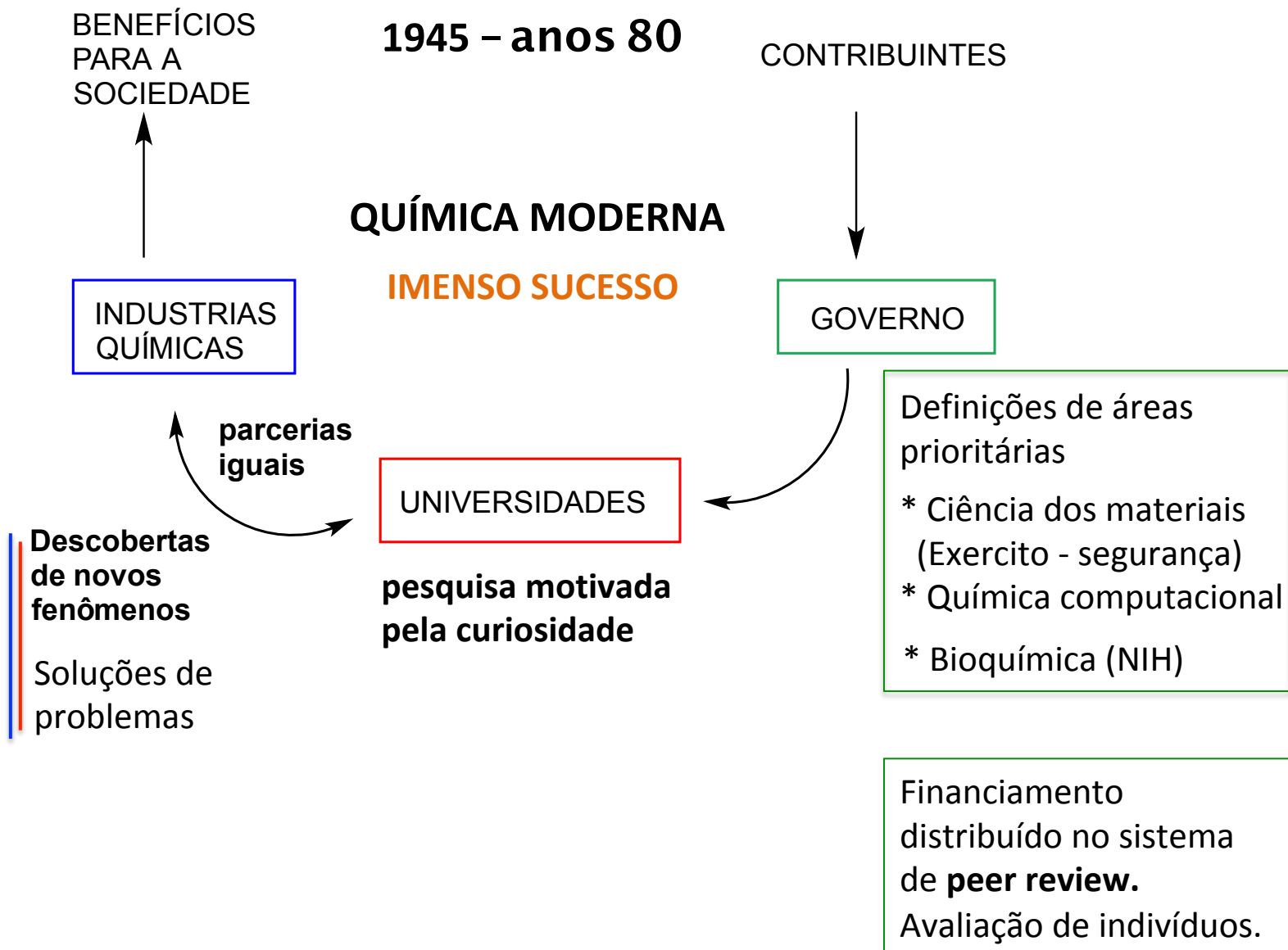
Reinventing Chemistry

*George M. Whitesides**



‘Uma definição simples do campo da química como sendo “átomos, moléculas e reações” não faz jus ao seu potencial, suas obrigações para com a sociedade ou a complexidade dos desafios que ela enfrenta’

COLABORAÇÃO DE TRÊS ATORES NA CONTRUÇÃO DA QUÍMICA MODERNA



COLABORAÇÃO DE TRÊS ATORES NA CONTRUÇÃO DA QUÍMICA MODERNA

- * Desenvolvimento de produtos
- * Curto prazo
- * Mercado e lucros

Aos poucos foram se afastando da pesquisa fundamental de longo termo...

BENEFÍCIOS PARA A SOCIEDADE

Após anos 90

CONTRIBUINTES

QUÍMICA MODERNA

INDUSTRIAS QUÍMICAS

GOVERNO

- Definições de áreas prioritárias
- * Ciência dos materiais (Exercito - segurança)
- * Química computacional
- * Bioquímica (NIH)

parcerias iguais

UNIVERSIDADES

pesquisa motivada pela curiosidade

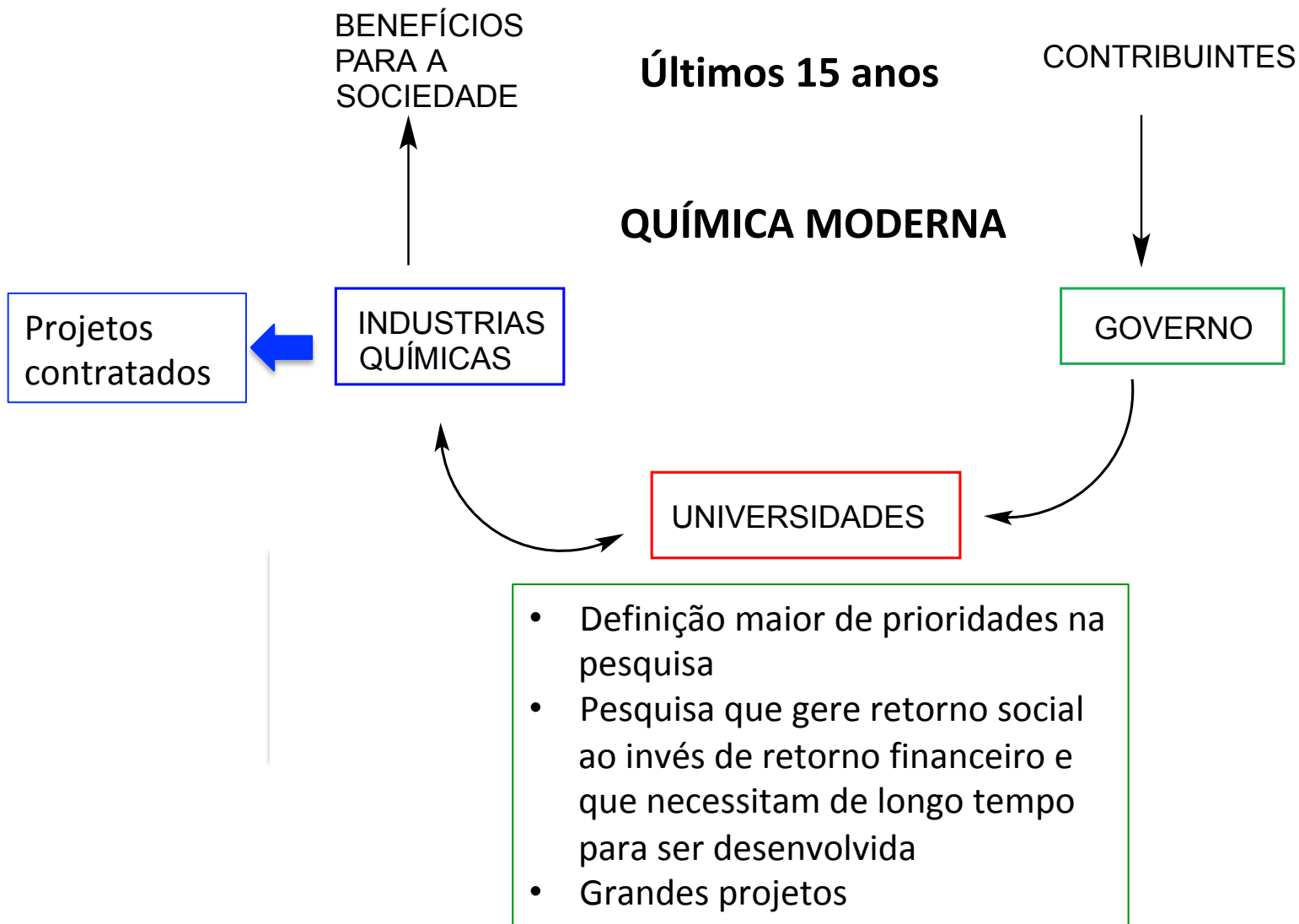
Descobertas de novos fenômenos
Soluções de problemas

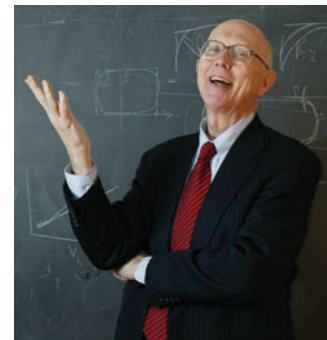
Sistema favorecendo grupos pequenos não trabalhando em cooperação; sem motivação para trabalho exploratório (*publish or perish*)

QUÍMICA ACADÊMICA CONSERVADORA INDIVIDUALISTA COMPETITIVA

Financiamento distribuído no sistema de **peer review**. Avaliação de indivíduos.

COLABORAÇÃO DE TRÊS ATORES NA CONTRUÇÃO DA QUÍMICA MODERNA



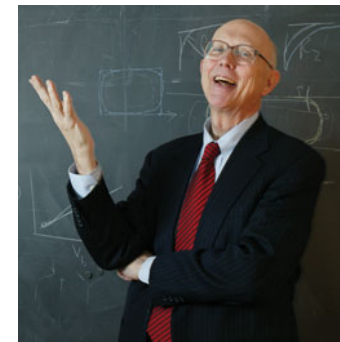


A QUÍMICA não é mais apenas sobre átomos e moléculas, mas sobre o que ela, como um campo com capacidades únicas na manipulação de moléculas e matéria, pode fazer para entender, manipular e controlar sistemas complexos de átomos e moléculas.

Seu futuro: de células vivas a megacidades e da utilização da luz solar à melhoria da saúde.

**As oportunidades químicas são hoje as necessidades urgentes
Variedade de problemas...**

Liderança das universidades de pesquisa no processo de mudança:



- Fusão de departamentos
- Mudança nas avaliações para *tenure* – crédito para a pesquisa colaborativa.



Study at Cambridge

About the University

Research at Cambridge

Quick links

Search

Login

Department of Chemistry

Home

About us

Research

People

Study

Outreach

Resources

Alumni

Support Chemistry

Internal

Research Interest Groups

Department of Chemistry

Research

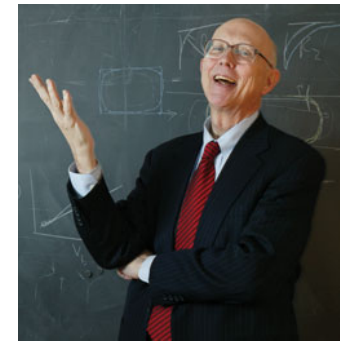
Research Interest Groups

- > [Biological](#)
- > [Materials Chemistry](#)
- > [Physical Chemistry](#)
- > [Synthetic Chemistry](#)
- > [Theory](#)

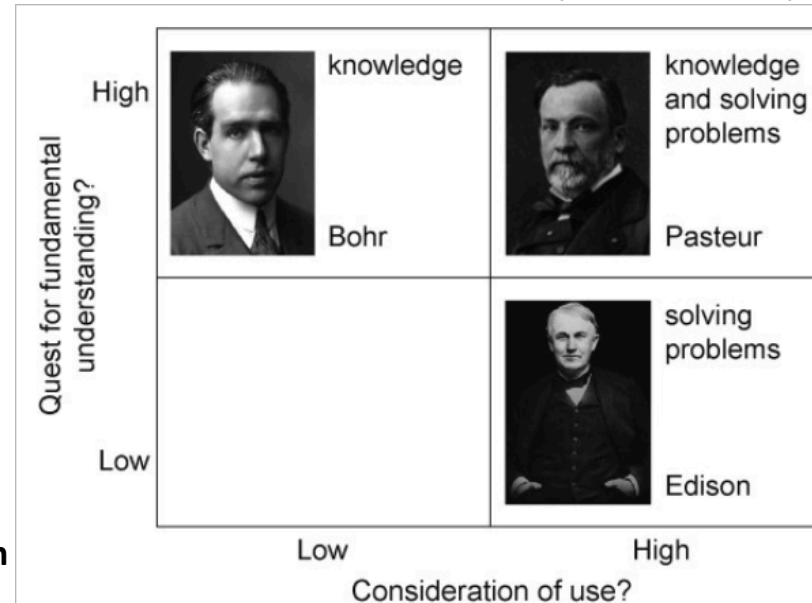
The Chemistry Department consists of 58 academic leads covering a wide spectrum of science. At a departmental level academic interests in Chemistry are defined according to 5 research areas:

1. **Biological** with a focus on enzymes, nucleic acids, protein folding and misfolding, and physical techniques; with relevance to health and disease, drug discovery, sensors, nanotechnology, ageing and energy research applications.
2. **Materials Chemistry** including surfaces, interfaces, polymers, nanoparticles and nanoporous materials, self assembly, and biomaterials, with applications relevant to: oil recovery and separation, catalysis, photovoltaics, fuel cells and batteries, crystallization and pharmaceutical formulation, gas sorption, energy, functional materials, biocompatible materials, computer memory, and sensors.
3. **Physical Chemistry** including atmospheric sciences, surfaces and interfaces, materials, and physical and chemical aspects of the behaviour of biopolymers and other soft systems.
4. **Synthetic Chemistry** including complex molecule synthesis, synthetic catalysis, synthetic assembly, synthetic biology and medicine, new technology for efficient synthesis, green synthesis, and preparation of new materials.
5. **Theory** including quantum dynamics, modelling soft materials, protein folding and binding, biomolecules in motion, pharmacological

Liderança das universidades de pesquisa no processo de mudança:



- Ampliação da formação dos alunos em diversos campos
- Treinamento na resolução de problemas
- Re-estruturação de grupos de pesquisa (mestre + aprendiz) ...
“Estudantes no curto espaço de tempo terão de enfrentar problemas que seus orientadores não sabem resolver!”
- Mudança no modo de fazer pesquisa - Quadrante de Pasteur (Don Stokes)
- PONTES COM A SOCIEDADE



#imaginando o futuro

REUNIÃO MAGNA . 2018

8-10 de maio

CONFERÊNCIA MAGNA | JEFFREY DEAN (GOOGLE/EUA)
*“Deep Learning for Tackling Grand Scientific and
Engineering Challenges”*

Lidera o projeto Google Brain.
APRENDIZADO DE MÁQUINA

Nivio Ziviani (UFMG/Brasil)
*“Mobilizando conhecimento para geração de riqueza
por meio da inovação”*

NEWS

Revolutionary computer program could change chemistry forever

BY MATTHEW GUNTHER | 10 AUGUST 2016



Software can tell chemists how to make new molecules from scratch and its inventors claim it has already mapped out a cheaper route to a blockbuster drug

Vídeo no site



Chematica

Últimos 15 anos: Grzybowski e colegas inseriram manualmente informação sobre ~ 10 milhões de substâncias e as reações que as conectam num software complexo...

Syntaurus

REGRAS?
 ...Codificaram manualmente mais de 20 mil regras químicas no software, levando em conta grupos incompatíveis, químicas de proteção e pequenas diferenças em distancias e ângulos de ligação...

B. Grzybowski (Ulsan National Institute of Science and Technology, South Korea and the Polish Academy of Sciences)

AI-invented syntheses prove a hit as they make their lab debut



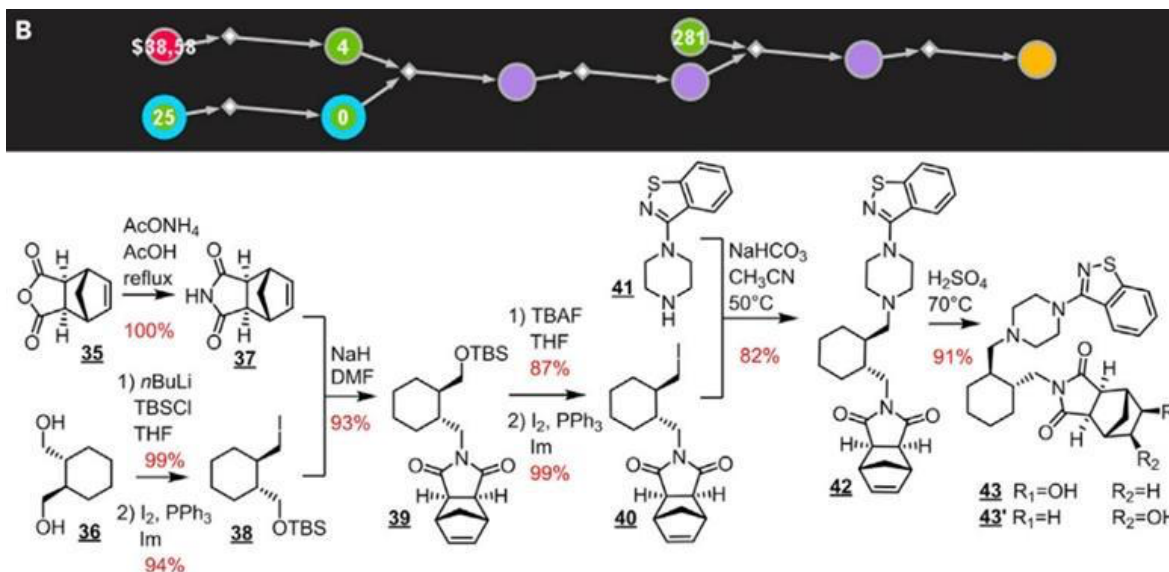
BY KATRINA KRÄMER | 2 MARCH 2018

Dronedarona (*blockbuster* anti-arrhythmia):
protegido por 46 patentes

- Chematica forneceu rota que dribla as reações protegidas, resultando em mesmo rendimento global

‘This is the first time, to the best of my knowledge, that a computer program predicts a synthesis, you go to the lab and – boom! – it works.’

B. Grzybowski



Letter

Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments

Paul Raccuglia, Katherine C. Elbert, Philip D. F. Adler, Casey Falk, Malia B. Wenny, Aurelio Mollo, Matthias Zeller, Sorelle A. Friedler , Joshua Schrier  & Alexander J. Norquist 

Formação de materiais híbridos por métodos solvotérmicos ou hidrotérmicos pouco compreendida.

APRENDIZADO DE MÁQUINA

Algoritmos treinados usando

Dados de resultados de sínteses hidrotérmicas **que não deram certo** (cadernos de laboratório arquivados) + **descrições de propriedades físico-químicas.**

PARA PREVER O **SUCESSO** DA REAÇÃO / CRISTALIZAÇÃO DE SELENITOS DE VANÁDIO

TESTE:

Sínteses hidrotérmicas experimentais (com agentes direcionadores disponíveis no mercado não usados no treinamento:

TAXA DE SUCESSO = 89%

Machine learning hits the big screen

BY MATTHEW GUNTHER | 14 MAY 2018

Deep learning algorithms set to transform time-consuming molecular screening programs

J. Staker* *et al*, 2017, *arXiv*: [1802.04903](https://arxiv.org/abs/1802.04903)

*US software company Schrodinger.

APRENDIZADO DE MÁQUINA TRANSFORMANDO O MODO COM QUE OS QUÍMICOS AVALIAM MOLÉCULAS E EXPLORAM SEU COMPORTAMENTO QUÍMICO

- Desenvolveram rede neural capaz de encontrar, num documento, imagens de estruturas moleculares, identificar ligações e átomos e converte-las em formato digital = SMILES.
- Na preparação do algoritmo: treinado usando conjuntos de estruturas e os SMILES correspondentes (128 milhões até ficar pronto)...
- Após treinamento extensivo, o algoritmo **com comportamento humano – intuição**, de acordo com Staker...

CHEMCEPTION:

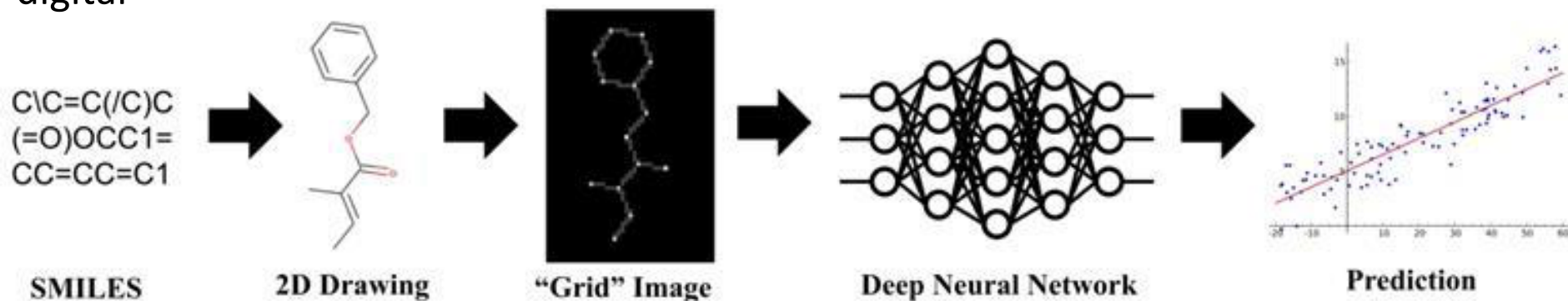
G B Goh* *et al*, 2017, *arXiv*: [1706.06689](https://arxiv.org/abs/1706.06689)
 Pacific Northwest National Laboratory USA

- Treinamento com conjunto de dados = milhares de moléculas relacionadas à sua toxicidade, atividade anti-HIV e energia de solvatação

Ao invés de partir de uma imagem, o processo começa com SMILES (formato digital)

Alimentada na rede neural Chemception

A plataforma prevê toxicidade potencial, atividade, solubilidade de novas moléculas...



Future of the chemical sciences

Download our
report



What will chemistry look like in ten to twenty years?



Future of the Chemical Sciences

Alejandra Palermo Dip Chem Eng. PhD FRSC
Royal Society of Chemistry

<http://www.rsc.org/campaigning-outreach/campaigning/future-of-the-chemical-sciences/>

Looking to the future: four plausible scenarios

Overview

In this turbulent and changing world, the future of the chemical sciences is unclear and cannot be defined in a single frame.

We have developed four plausible future scenarios, exploring how some of our seven themes might play out and interact in different ways. Each is

Scenario 1: Chemistry saves the world

The chemical sciences have the potential to solve many of the world's greatest challenges. What effect would this have on chemists and the chemical sciences?

Scenario 2: Push-button chemistry

As the world becomes more connected, science and technology may become decentralised. How would automated, remote and modular chemistry change the world?

Scenario 3: A world without chemists

Without the chemical sciences as a clear discipline and distinct university subject, the pipeline of future chemists could dry up. What would happen in a world without chemists?

Scenario 4: Free market chemistry

If austerity measures continue in the world's biggest economies, public funding for research could be withdrawn entirely. How would chemists adapt to a world where scientific discovery is driven by the priorities of private funders?

Obrigada