

**41<sup>a</sup>**



**Reunião Anual  
Sociedade Brasileira de Química**



**CONSTRUINDO O AMANHÃ**

**de 21 a 24/05/2018**

**Foz do Iguaçu, PR**



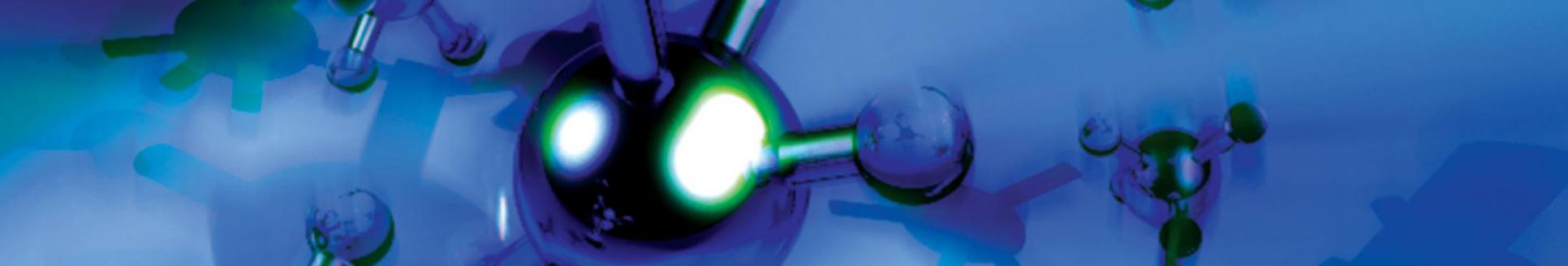
Realização:

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.**



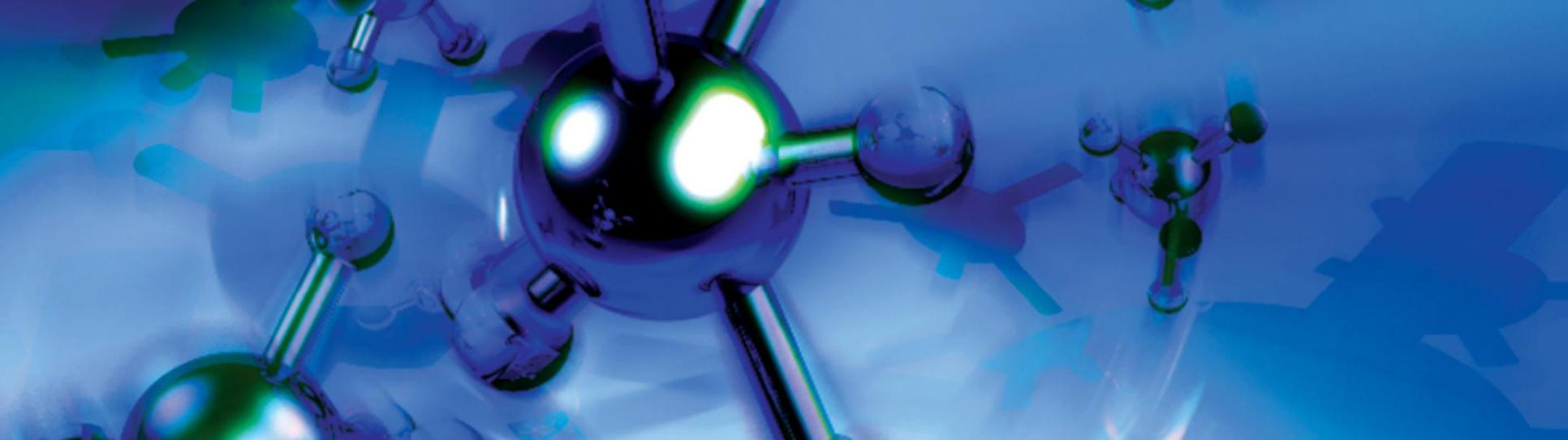
***Simpósio 2: Perspectivas dos PPGQ e inserção dos futuros profissionais/Cenários futuros para a formação do pós-graduando.***

*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?

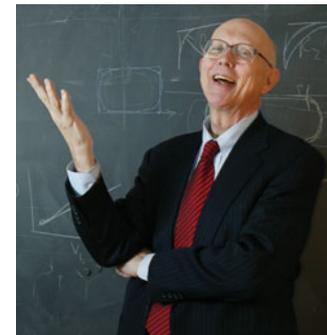
- nos tipos de produtos e serviços que químicos prestam;
- nas ferramentas e métodos por eles usados.

QUÍMICOS: é importante entender:

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

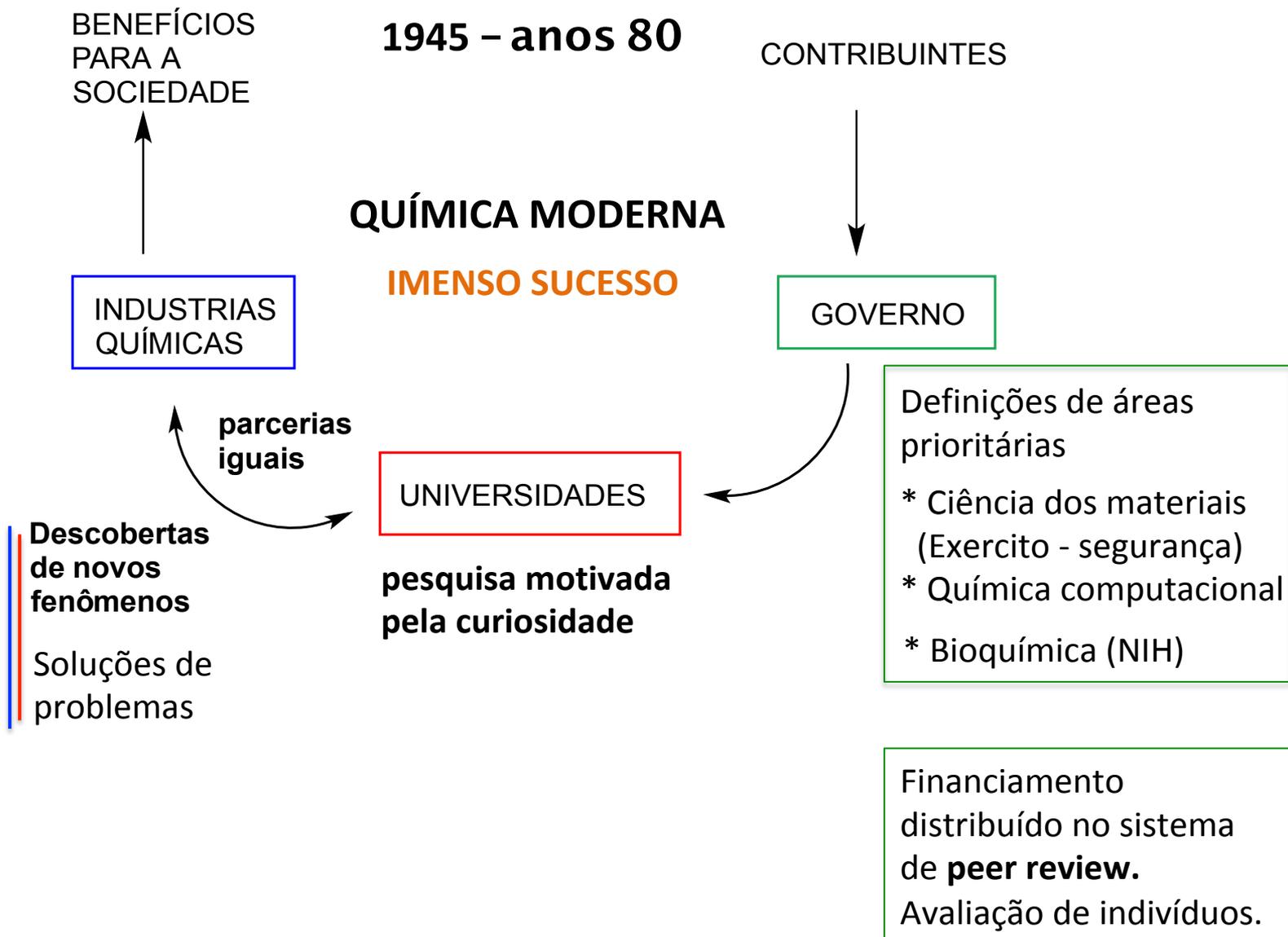
# Reinventing Chemistry

*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’

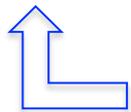
# COLABORAÇÃO DE TRÊS ATORES NA CONTRUÇÃO DA QUÍMICA MODERNA



# 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...



Descobertas de novos fenômenos  
Soluções de problemas

BENEFÍCIOS PARA A SOCIEDADE

INDUSTRIAS QUÍMICAS

parcerias iguais

Após anos 90

QUÍMICA MODERNA

UNIVERSIDADES

pesquisa motivada pela curiosidade

CONTRIBUINTES

GOVERNO

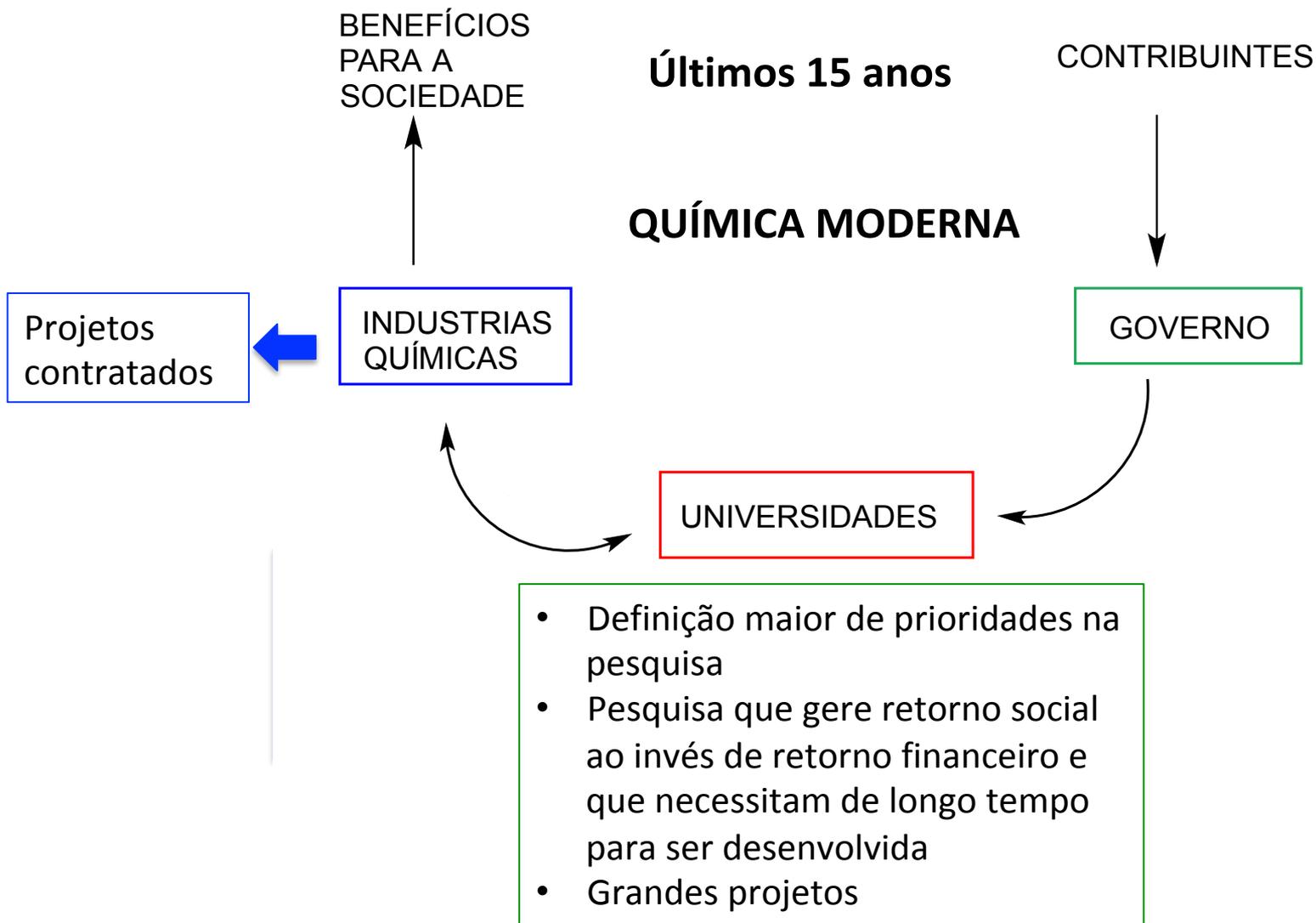
- Definições de áreas prioritárias
- \* Ciência dos materiais (Exercito - segurança)
  - \* Química computacional
  - \* Bioquímica (NIH)

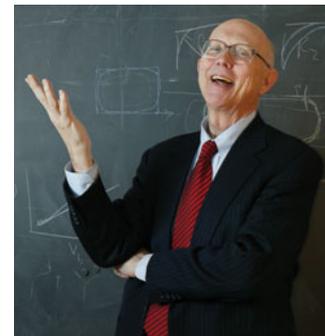
Sistema favorecendo grupos pequenos não trabalhando em cooperação; sem motivação para trabalho exploratório (*publish or perish*)

QUÍMICA ACADÊMICA CONSERVADORA INDIVIDUALISTA COMPETITIVA

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

# COLABORAÇÃO DE TRÊS ATORES NA CONTRUÇÃO DA QUÍMICA MODERNA



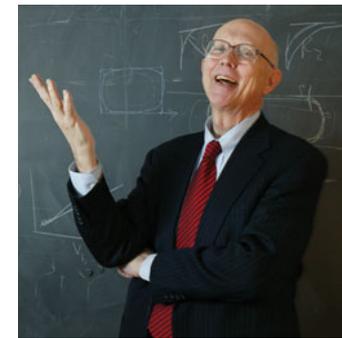


**A QUÍMICA não é mais apenas sobre átomos e moléculas, mas sobre o que ela, como um campo com capacidades únicas na manipulação de moléculas e matéria, pode fazer para entender, manipular e controlar sistemas complexos de átomos e moléculas.**

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

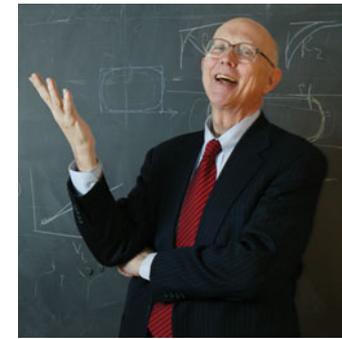
#### Research Interest Groups

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

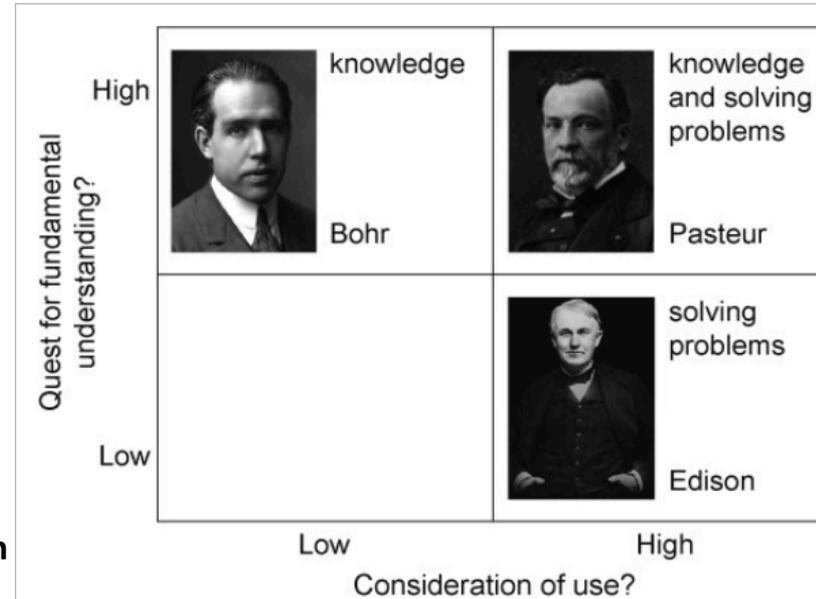
The Chemistry Department consists of 58 academic leads covering a wide spectrum of science. At a departmental level academic interests in Chemistry are defined according to 5 research areas:

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

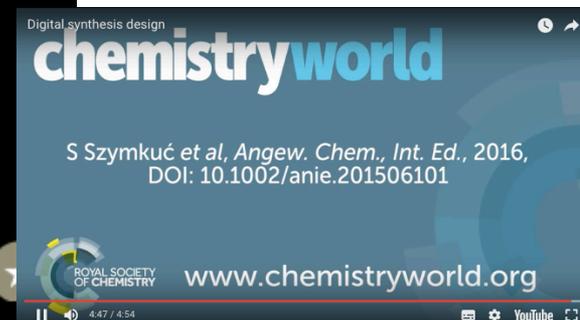
# Revolutionary computer program could change chemistry forever

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



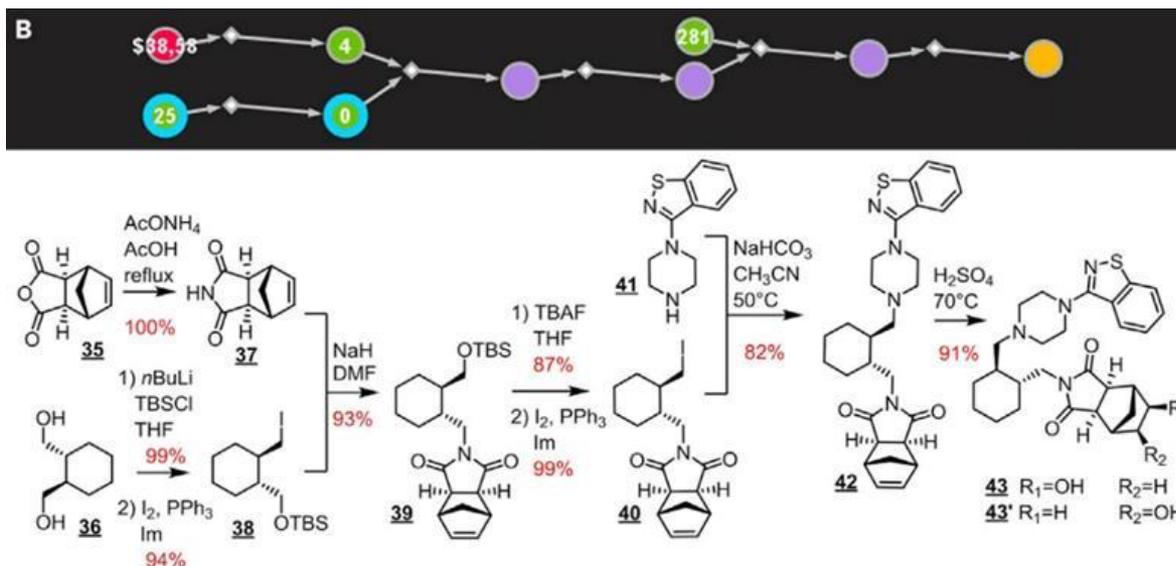
BY KATRINA KRÄMER | 2 MARCH 2018

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:

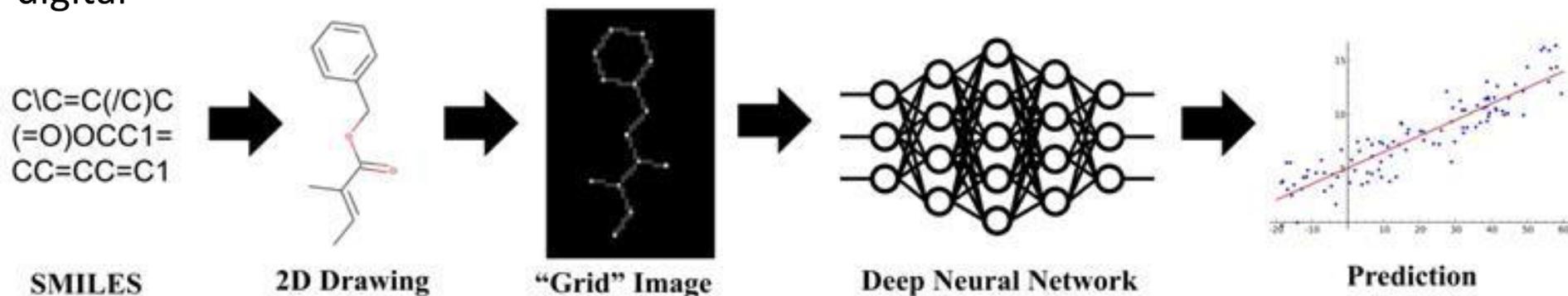
G B Goh\* *et al*, 2017, *arXiv*: [1706.06689](https://arxiv.org/abs/1706.06689)  
 Pacific Northwest National Laboratory USA

- 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**