


Carta do Editor
Alquimista completa 10 anos de existência

Neste mês de dezembro e ao lançarmos a edição de número 120 estamos comemorando os primeiros dez anos de existência do Alquimista. Considerando-se que a cada edição mensal editamos seis páginas de texto e fotos, neste mês estaremos acumulando o alentado volume de 720 páginas já colocadas em circulação e à disposição dos nossos leitores. Durante todo este decênio mantivemo-nos absoluta e rigorosamente fiéis aos nossos princípios e valores de bem informar, através da veiculação de notícias, artigos, informações e entrevistas de real interesse a toda a nossa comunidade iqueana. Apresentado nas versões eletrônica e mural, contamos a cada mês com centenas de consulentos, o que muito nos orgulha e nos anima e estimula verdadeiramente a continuarmos no nosso labor. Mas isto só foi possível e o será doravante graças à dedicação dos nossos valorosos colaboradores. Aproveito esta oportunidade para expressar a toda nossa equipe e aos nossos estimados leitores os votos de Feliz Natal e Próspero 2015.

Paulo Marques, editor em exercício.

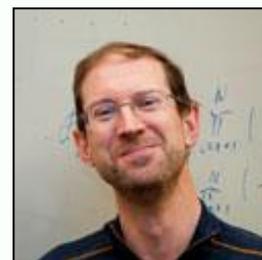
My visit to USP

This is a report on my recent visit to the Chemistry Department at USP as a guest of Profa. Antonia T. do Amaral and some of my impressions of Brazil, the science done in Brazil and of the people I met. In brief Brazil is a wonderful country and stands on the brink of making great contributions to the science of molecular modeling and ligand discovery.

Before I provide details on my time in Brazil I will give some details about me. My background is in organic synthesis, medicinal chemistry and ligand design; I made the change to molecular modeling and computational ligand design over a decade ago and have been at OpenEye Scientific as an application scientist for almost ten years. In that time I have focused on ligand-based methods in virtual screening, conformational analysis and the application of statistical techniques to understanding improvements in computational methods.

Antonia and I met initially at the Gordon CADD Conference in July 2013 and quickly decided that there would be a lot of value in me coming to USP to meet her students and to give lectures and workshops. The 2014 Brazilian MedChem meeting provided an excellent reason to come to Brazil, so at Antonia's invitation I did just that. Having never been to Brazil before (or anywhere in South America for that matter) I had little idea what to expect about the meeting, the science being done in Brazil, the people I would meet and so on. What I found was a beautiful country populated by friendly people with a lot more work in molecular modeling and computational ligand design being done than I had ever imagined. My time at the Brazilian MedChem meeting left me full of optimism about the future of computational ligand design in Brazil and eager to see more of what was being done in that area here. So after the meeting was over I came to the Chemistry Department at the University of Sao Paulo to teach workshops for graduate students and undergraduates on understanding protein structure quality, the application of statistical methods to optimizing virtual screening and protein active site comparison. During my regrettably short visit I was able to meet the members of Antonia's group and some of the undergraduates and graduate students in the Chemistry Department. Uniformly the students were motivated, hard-working and genuinely interested in learning more about the topics I presented. Their enthusiasm made my role as a teacher far more rewarding.

My thanks are due to the University of Sao Paulo for financial support for my visit. More than that my gratitude goes to the people I met while I was here, who made my visit the success it was. In particular Antonia for all her hard work in making the arrangements for my stay in Sao Paulo and for my lectures at the Chemistry Department. Also I am deeply grateful to a number of Antonia's students for making we feel very welcome, both at the Brazilian MedChem meeting and at USP, in particular Erika Piccirillo who made great efforts to show me some of the sights (and delightful food) of Sao Paulo.



Prof. Paul Hawkins



Falece o Prof. Teng



Prof. Paulo Teng
(25/01/1952 - 28/11/2014)

É com grande pesar que informamos o falecimento do Professor Paulo Teng An Sumodjo, ocorrido no dia 28 de novembro de 2014. No último dia 10 de dezembro, familiares e membros do IQ lotaram o Anfiteatro Cinza para oferecerem uma homenagem ao professor. A equipe do Jornal Alquimista externa, igualmente, as suas sinceras condolências à família, amigos e colegas.

Paulo Teng possui Doutorado em Química (Físico-Química) (1985) e título de Livre Docente em Físico-Química (2010) pela Universidade de São Paulo. Realizou estágio de pós-doutoramento na Universidade da Califórnia, Los Angeles (1995/1996) onde também foi pesquisador visitante (2002). Era professor associado da Universidade de São Paulo, com experiência na área de Físico-Química, com ênfase em Eletroquímica, atuando principalmente nos seguintes temas: eletrodeposição, filmes magnéticos, filmes de diamante e filmes de óxidos.



Gostaríamos de falar sobre o convívio social com o Prof. Paulo.

Todos sabem de sua personalidade sisuda, mas a convivência diária nos fez conhecer um lado mais humano e entender que as reclamações na verdade tinham sentido. Era um desejo de justiça, retidão, até mesmo de correção do mundo e da própria Universidade. O Prof. Paulo Teng faz e continuará fazendo muita falta para nós. Ele sempre foi muito presente e por isso nos lembramos dele a todo o momento. As constantes reclamações a respeito da nova configuração da sala e as broncas pelo café não estar pronto no horário são alguns exemplos do jeito inconfundível dele que marcavam nosso dia a dia. Mas era a preocupação dele conosco que vai sempre ficar em nossa lembrança. Não a preocupação com nosso trabalho, mas conosco mesmo; se estávamos bem, se estávamos nos divertindo. Afinal, como ele sempre dizia, o importante era se divertir.

Wellington Adriano

Veja mais fotos em: <http://goo.gl/5o2v1s>

Encontro dos aposentados



No dia 28 de novembro de 2014 ocorreu o 2º Encontro dos Aposentados do IQUSP, o qual reuniu dezenas de ex-funcionários e docentes que tiveram a oportunidade de rever e relembrar pessoas que trabalharam no IQ há vários anos atrás.

A cerimônia foi aberta pelo Prof. Henrique Toma, com a leitura da poesia “Procura-se um amigo” de Vinícius de Moraes, e contou com o acompanhamento musical da Profª. Pérola tocando clássicos no piano.

Funcionários e professores tomaram a palavra para agradecer pela presença e os diversos anos de trabalho duro. Houve também uma confraternização com música, petiscos e distribuição de lembranças.



Veja mais fotos em: <http://goo.gl/B2Ijmo>

ANIVERSARIANTES

Parabéns aos aniversariantes do IQ - mês de novembro -

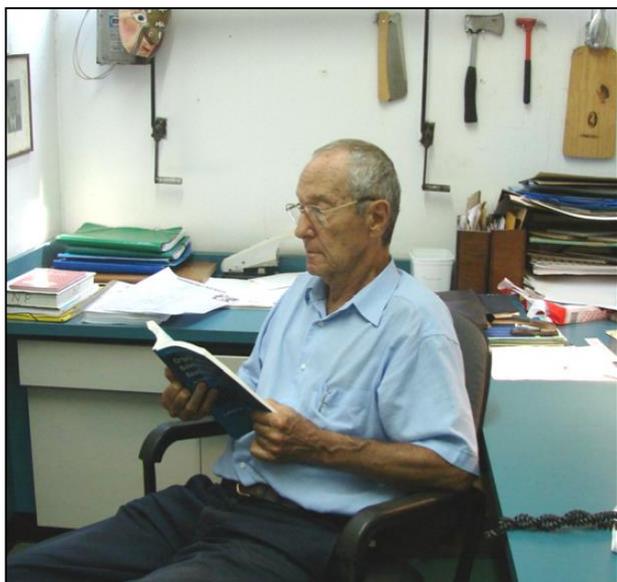
1/12. Koiti Araki
2/12. Sandra Regina de Souza
2/12. Viviane S. M. de Oliveira
5/12. Marcelo P. dos Santos
7/12. Ruth Salome Mejia Claire
11/12. Silvia Helena P. Serrano
15/12. Antonia da Silva Araujo
15/12. Jonas Gruber

15/12. Zilda Antonia M. Izzo
17/12. Mauro Carlos C. Ribeiro
18/12. Eloiza A. A. S. Palma
21/12. Glaucia Mendes Souza
22/12. Janaina N. dos Prazeres
22/12. Roberto Kopke Salinas
23/12. Nanci Camargo Silva
24/12. Carolina Gimiliani L. Horta

24/12. Rafael H. de Oliveira
26/12. Christiane Cardoso
26/12. Gerson Nunes da Silva
26/12. Patricia Busko Di Vitta
29/12. Rubens Pereira Pardim
31/12. Caio Eduardo C. Vasco
31/12. Paola Corio

Site divulga trabalho artístico do Prof. Nicola Petragrani

www.nicolapetragnani.com.br



Nascido em 16 de maio de 1929 em Roma, filho de Giovanni Petragrani, que foi professor universitário, reitor da Universidade de Siena e microbiologista de fama internacional, Nicola Petragrani passou os primeiros anos de sua vida na sua terra natal, onde cursou até o 1º ano de Química na Universidade de Roma.

Em 1947 mudou-se para o Brasil e continuou seus estudos de Química na Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras da Universidade de São Paulo, formando-se em 1951. Fez seu doutorado sob a orientação do Professor Heinrich Rheinboldt, fundador do curso de Química da USP, e defendeu sua tese em 1957.

No início dos anos 80, fascinado com a beleza plástica da representação espacial de moléculas orgânicas e átomos, começou a descobrir na oficina/ateliê um novo prazer e vocação, em que fantasia e criatividade se descolavam dos rigores científicos do laboratório e da academia.

O ferro, o cobre, o latão e o bronze, além de tubos de plástico, cabos, sobras de uma belíssima coleção de material náutico (à qual ele se dedicou por anos, contando ainda com um importante acervo em sua casa do Guarujá), raízes e nós de pinho passaram a ser soldados, moldados e polidos até que pássaros, gatos, peixes, insetos, monstros e guerreiros surgissem, alguns tão fascinantes que pareciam afirmar que a razão de ser daquelas matérias em estado bruto era sua própria criação.

Em suas próprias palavras, “manusear estes materiais, tocá-los e alisá-los proporciona satisfação física e material que a química atual, feita de miligramas e medidas espectrométricas, não me proporciona mais”.

A fim de se divulgar o trabalho de Nicola Petragrani, foi criado o site www.nicolapetragnani.com.br. Este projeto teve, em sua origem, dois objetivos:

O primeiro, registrar e garantir a perpetuidade e acesso ao acervo de obras produzidas por Nicola Petragrani, algumas das quais, por conta da exposição às intempéries, se encontram degradadas em diferentes graus (diversas obras que se encontram na casa do Guarujá estão, desde sua criação, ao ar livre, e embora algumas tenham recebido manutenção e

retoques pelo próprio autor, ao longo de sua existência, outras acabaram por deteriorar-se, como pode ser visto através da visita ao acervo, já que todas as obras foram fotografadas em seu estado).

O segundo, divulgar este trabalho além do perímetro de seu círculo de parentes, amigos e colegas. Embora este círculo esteja longe de ser pequeno, foram poucas as exposições públicas de suas peças. Talvez isso se deva a uma certa auto-suficiência do autor, talvez a alguma timidez. Mas mais certa parece ser a tese de que um químico acadêmico, pesquisador de grande dedicação e produção, submetido constantemente em sua atividade profissional às avaliações de seus pares, simplesmente buscou em sua arte a beleza, a liberdade criativa, o contato com o material que, em suas mãos, se transformava. Tal tese é corroborada pelo apego ferrenho que tinha às suas criações: poucos foram os felizardos presenteados com suas peças. Pouquíssimos os que o convenceram a vender alguma.

Ao longo deste projeto, durante o ano de 2013 e início de 2014, Nicola Petragrani, que na adolescência, ainda na Itália, teve poliomielite, sofreu sensível piora em sua mobilidade, que acabou por afastá-lo definitivamente da oficina.

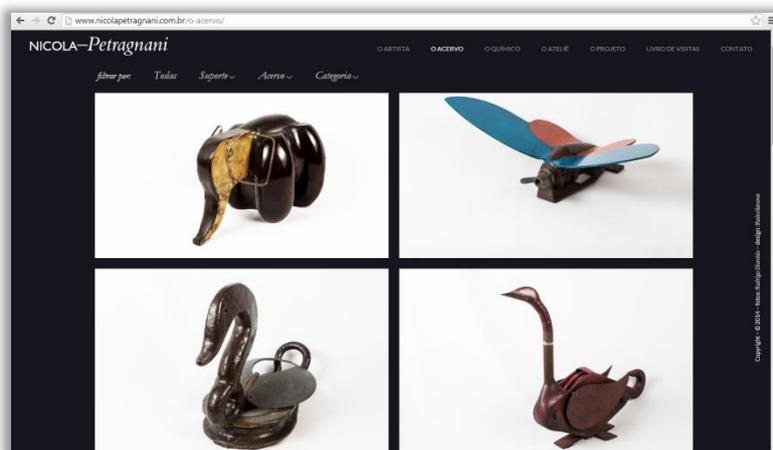
Assim, um terceiro objetivo acabou por se somar aos originais: o de homenagear o autor, levando-o a perceber toda a magnitude e vigor de sua obra, aqui agrupada e ordenada, evidenciando assim a criatividade e energia que ele foi capaz de transformar em acervo consistente e orgânico.

As fotos deste site foram feitas por Rodrigo Dionísio, ao longo de 4 intensos dias de trabalho: dois na casa do Guarujá (e ateliê), nos dias 2 e 3 de março de 2013, e dois no apartamento de São Paulo, nos dias 4 e 5 de março de 2013. Rodrigo gentilmente informa que estas belas imagens são protegidas segundo a Lei 9610/98, que rege os Direitos Autorais no Brasil, e acrescenta que elas só poderão ser utilizadas após sua autorização expressa, sendo proibida sua cópia, reprodução ou inserção em outra obra ou veículo, com ou sem fins comerciais.

O site foi elaborado com muita delicadeza e competência por Thais Vilanova.

A curadoria esteve a cargo de Fabio Martinelli que, juntamente com Sema Petragrani, faz saber que procurará responder a todos os eventuais contatos feitos através deste site da melhor e mais breve maneira possível.

Sema Petragrani



Nota do editor: O Prof. Petragrani teve uma breve biografia publicada na edição nº 3 do Alquimista (fevereiro de 2005), e uma entrevista na edição nº 41 (abril de 2008).

Pesquisa pode abrir caminho para novas drogas contra esclerose lateral amiotrófica

Ainda não são bem compreendidos pela ciência todos os fatores que levam ao desenvolvimento da esclerose lateral amiotrófica (ELA) – doença progressiva e fatal caracterizada pela degeneração dos neurônios motores. Dados da literatura científica, porém, indicam que o processo de agregação de uma proteína conhecida como superóxido dismutase desempenha um papel-chave no mecanismo patológico.

Em um artigo publicado recentemente no *The Journal of Biological Chemistry*, pesquisadores da Universidade de São Paulo (USP) descreveram uma nova via de agregação da superóxido dismutase relacionada com a oxidação de um de seus resíduos de aminoácido: o triptofano 32.

A descoberta pode abrir caminho para o desenvolvimento de novas drogas contra a ELA, doença rara (1 caso para cada 100 mil pessoas por ano), cujo portador mais conhecido talvez seja o cientista Stephen Hawking, da University of Cambridge, no Reino Unido.

“A superóxido dismutase é uma das principais defesas antioxidantes do organismo humano. Sua função primordial é neutralizar um radical livre de oxigênio conhecido como ânion superóxido, que, em excesso, pode ser tóxico para as células”, explicou Ohara Augusto, professora do Instituto de Química da USP e coordenadora do Centro de Pesquisa em Processos Redox em Biomedicina (Redoxoma), um dos Centros de Pesquisa, Inovação e Difusão (CEPIDs) da FAPESP.

De acordo com a pesquisadora, estudos anteriores mostraram que na medula de portadores de ELA e de modelos animais da doença é possível encontrar agregados de superóxido dismutase, bem como danos oxidativos em proteínas, lipídeos e moléculas de DNA.

“O dano oxidativo existe, sem dúvida, mas se ele é causa ou consequência da doença ainda não sabemos ao certo”, disse Augusto. Ainda de acordo com a literatura científica, cerca de 10% dos casos de ELA são hereditários e, em 20% desses, é possível encontrar mutações no gene da superóxido dismutase. No entanto, os outros 90% são considerados casos esporádicos, com etiologia desconhecida.

“Mutações na enzima isoladamente não explicam a doença, mas, como os sintomas e a evolução da forma familiar e esporádica de ELA são semelhantes, pressupõe-se um mesmo mecanismo patogênico para ambas. Modificações oxidativas na superóxido dismutase poderiam explicar mudanças estruturais que levariam à agregação proteica”, disse Augusto.

Algumas modificações oxidativas na enzima relacionadas com a ELA já haviam sido descritas por outros grupos, mas o trabalho dos pesquisadores do Redoxoma foi o primeiro a descrever uma via que envolve a oxidação do triptofano 32 – um aminoácido encontrado na superóxido dismutase de humanos e de símios, mas não na de outros mamíferos.

Coincidentemente ou não, a ELA é uma doença descrita por cientistas quase exclusivamente em símios, o que sugere que a oxidação do triptofano 32 está de alguma forma envolvida no mecanismo patológico.

“Para induzir a doença em roedores, por exemplo, foi necessário fazer animais transgênicos, capazes de expressar a enzima humana”, contou a pesquisadora.

Em um trabalho anterior, Augusto havia descrito que em determinadas situações a enzima superóxido dismutase pode desempenhar uma atividade pró-oxidante e, nesses casos, formar um radical carbonato. Em experimentos *in vitro* a pesquisadora mostrou que esse radical carbonato é o responsável por oxidar o aminoácido triptofano 32.

“Ao ser oxidado, esse triptofano 32 se liga a outra molécula da enzima – um radical triptofanila – e forma um tetrâmero (*molécula composta por quatro unidades*). Mostramos por técnicas

espectroscópicas que isso leva a enzima a se desenovelar (*perder a forma funcional*) e a se agregar”, contou Augusto.

Para fazer o experimento, os pesquisadores usaram enzimas humanas recombinantes, ou seja, produzidas em laboratório utilizando bactérias geneticamente modificadas para expressar o gene da superóxido dismutase.

Foram usadas tanto a enzima normal (*wild type*), quanto uma das formas mutantes associadas à ELA, conhecida como G93A. Para estimular a atividade pró-oxidante, os pesquisadores incubaram as duas versões da enzima com água oxigenada e bicarbonato.

“A enzima usa a água oxigenada para oxidar outras moléculas – nesse caso, a própria enzima, que se torna inativa. Já o bicarbonato foi usado por ser o tampão fisiológico por excelência, ou seja, é uma substância encontrada em todos os fluidos do organismo humano e atua como corretor de pH”, explicou Augusto.

O processo de oxidação das duas formas da enzima – a normal e a mutante – foi acompanhado pelos pesquisadores, em diferentes intervalos de tempo, durante uma semana. Todas as modificações sofridas na estrutura da proteína nos diferentes momentos analisados foram descritas com auxílio de técnicas de espectrometria de massa.

“Observamos que após uma hora de oxidação já começa a se formar um tetrâmero de 10 nanômetros (nm) de diâmetro, que permanece até 48 horas, e depois começam a se formar os agregados proteicos que chegam a 800 nm de diâmetro”, contou a pesquisadora.

De acordo com Augusto, o processo de agregação da mutante G93A foi um pouco mais acelerado que o da enzima normal, mas a diferença não foi estatisticamente significativa.

Em um dos experimentos realizados, os pesquisadores trocaram o aminoácido triptofano 32 por uma fenilalanina e, embora a enzima tenha ganhado atividade oxidativa na presença da água oxigenada, a agregação proteica não ocorreu.

“Esse resultado mostra que é, de fato, necessário haver o triptofano 32 oxidado para ocorrer a agregação. É algo que já havia sido proposto em estudos anteriores, mas nunca havia sido examinado na prática”, contou Augusto.

Na avaliação da cientista, caso novos estudos comprovem que também *in vivo* pode ocorrer a formação do radical carbonato e a consequente oxidação do triptofano, e que isso pode levar à agregação proteica, então esse aminoácido poderá se tornar um alvo terapêutico.

“Uma das possibilidades seria desenvolver um anticorpo capaz de reconhecer o ditriptofano, que é o produto da oxidação do triptofano 32, e impedir que as proteínas se agreguem”, afirmou Augusto.

O artigo *Oxidation of the tryptophan 32 residue of human superoxide dismutase 1 caused by its bicarbonate-dependent peroxidase activity triggers the non-amyloid aggregation of the enzyme* (doi: 10.1074/jbc.M114.586370) pode ser lido em www.jbc.org/content/early/2014/09/18/jbc.M114.586370.



Prof. Ohara

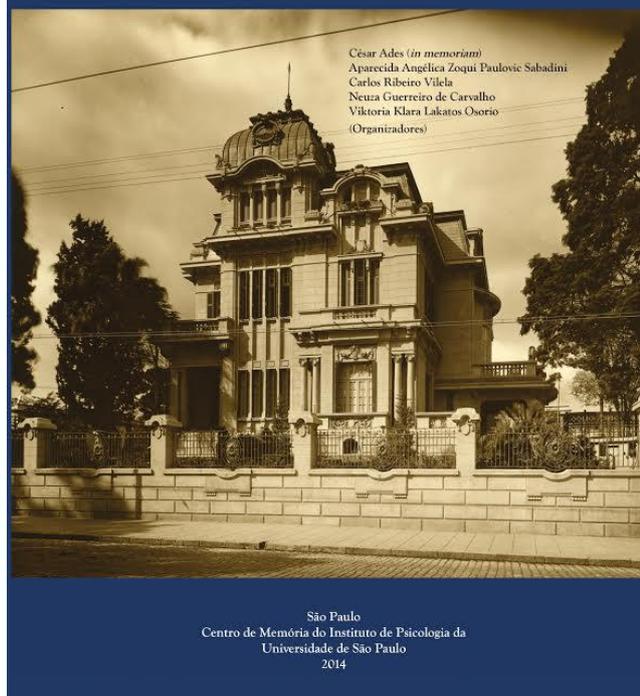


Artigo

Lançamento de livro

A Diretoria do Instituto de Psicologia da Universidade de São Paulo e a Comissão Executiva do Centro de Memória do Instituto convidam para o lançamento do livro “A Glette, o Palacete e a Universidade de São Paulo”, a se realizar no dia 12 de dezembro de 2014, sexta-feira, das 18h00 às 21h30min; na livraria EDUSP, localizada na Biblioteca Brasileira Guita e José Mindlin (Rua da Biblioteca, s/n, Cidade Universitária, São Paulo, SP). O livro é dedicado à Memória do Professor César Ades (1943-2012).

Organização: César Ades (in memoriam), Aparecida Angélica Zoqui Paulovic Sabadini, Carlos Ribeiro Vilela, Neusa Guerreiro de Carvalho, Viktoria Klara Lakatos Osorio.



Frase do mês

“Tudo é teoricamente impossível, até que seja feito”

Robert Anson Heinlein



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
- Instituto de Química -

Reitor

Prof. Dr. Marco Antonio Zago

Pró-Reitor de Cultura e Extensão

Profª. Dra. Maria A. Arruda

Diretor

Prof. Dr. Luiz Henrique Catalani

Vice-Diretor

Prof. Dr. Prof. Paolo Di Mascio

Chefe do DQF

Prof. Dr. Mauro Bertotti

Chefe do DBQ

Prof. Dr. Shaker Chuck Farah

Editor

Prof. Dr. Hermi F. Brito

Redator e Jornalista-Responsável

Prof. Dr. Paulo Q. Marques

(reg. prof. MTb nº 14.280/DRT-RJ)

Tiago B. Paolini (Secretário)

Colaboradores

Cássio Cardoso

Fábio Yamamoto

Helliomar Barboza

Ivan Guide N. Silva

Jaílton Cirino Santos

Lucas C. V. Rodrigues

Teses e Dissertações

Alunos do Programa de Pós-Graduação do IQ que defenderão seus trabalhos de Mestrado (M) e Doutorado (D)

- Kely Ferreira De Souza** – “Influência da queima da cana-de-açúcar nos níveis de HPAs, nitro-HPAs e oxi-HPAs associados ao aerossol atmosférico”. Orientadora: Profª. Drª. Lilian Rothschild. Dia 01/12/2014, às 14:00 h, no Anfiteatro Cinza (D).
- Rafael Martos Buoro** – “Derivados de lignina de DNA como agentes modificadores no desenvolvimento de sensores voltamétricos”. Orientadora: Profª. Drª. Silvia Helena Pires Serrano. Dia 05/12/2014, às 14:00 h, na Sala A1 do ‘Queijinho’ (D).
- Gabriela Mól Avelar Tamaki** – “Estudo da sinalização por GMP cíclico em *Blastocladiella emersonii*”. Orientadora: Profª. Drª. Suely Lopes Gomes. Dia 10/12/2014, às 13:30 h, na Sala A1 do ‘Queijinho’ (D).
- Anderson Melo Gaia** – “Metabólitos secundários e ontogenia em espécies de Piper”. Orientador: Massuo Jorge Kato. Dia 11/12/2014, às 13:30 h, no Anfiteatro Cinza (D).
- Nicole Quesada Torelli** – “Sinalização retrógrada RTG-dependente controla a atividade mitocondrial e resistência a estresse em *Saccharomyces cerevisiae*”. Orientadora: Profª. Drª. Alicia Juliana Kowaltowski. Dia 12/12/2014, às 09:00 h, no Anfiteatro Cinza (M).
- Cinthia Indy Tamayose** – “Determinação da atividade antirradicalar e da constituição química de infusões de chás”. Orientador: Josef Wilhelm Baader. Dia: 18/12/2014 às 14:00 h, no Anfiteatro Vermelho (M).
- Juliana Ferreira De Oliveira** – “Obtenção de Sílicas mesoporosas altamente ordenadas a partir das cinzas da casca de arroz e do bagaço de cana-de-açúcar”. Orientador: Jivaldo do Rosário Matos. Dia: 11/12/2014, às 09:00 horas, na Sala A1 do ‘Queijinho’ (M).

Milton Cesar

QUER COLABORAR?

Para colaborar com o jornal **ALQUIMISTA**, entre em contato através do e-mail: alquimia@iq.usp.br Eventos, artigos, sugestões de matérias ou qualquer outra atividade de interesse do IQUSP podem ser enviados. Todos podem colaborar. Sejam eles, professores, funcionários, alunos ou interessados.