### Curriculum Vitae

Ricardo Pereira Rodrigues Pesquisador

Data de nascimento: 1 ° de janeiro de 1982.

**Endereço:** Departamento de Ciências Farmacêuticas da Universidade Federal do Espírito Santo - UFES. Avenida Marechal Campos. 1468, Vitória 29043-900, ES, Brasil.



# **EDUCAÇÃO**

Doutorado. 2010-2014 Química Medicinal, Universidade de São Paulo (USP), Brasil.

Mestrado. 2006-2009 Química, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul (UFMS), Mato Grosso do Sul, Brasil.

Graduação. 2003-2006 Farmácia, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul (UFMS), Mato Grosso do Sul, Brasil.

## **EXPERIÊNCIA**

2016 - Atual: Pós-doutorado, Departamento de Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), Vitória, ES, Brasil.

2014 - 2016: Pós-doutorado, Departamento de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo (USP), Ribeirão Preto - SP, Brasil.

• Centrum für Chemie und Biomedizin - CCB, Áustria, 2016 (6 meses).

### **IDIOMAS**

- Português (nativo)
- Inglês (proficiente)
- Espanhol (básico)

## ATIVIDADE EDUCACIONAL

- 2017/2 QUÍMICA FARMACÊUTICA. 40h.
- 2017 real INTRODUÇÃO À MODELAGEM, TEORIA E PRÁTICA MOLECULAR. 16h.

## **SUPERVISÕES**

## **MESTRADO**

- Juliana Santa Ardisson. Estudo do efeito das naftopiranonas de espécies de paepalanthus sp em Helicobacter pylori, macrófagos ativados e linhas celulares de adenocarcinoma gástrico. Programa de Mestrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), 2017 -2018; co-supervisor.
- Jéssica Rodrigues Pereira de Oliveira. Estudos in vitro e in silico de chalconas obtidas por síntese com potencial anti-Helicobacter pylori, antiinflamatório e antitumoral. Programa de Mestrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), 2018-2020; cosupervisor.
- Jéssica Raquel Borges Monteiro. Estudo prospectivo da atividade antitumoral em Laurencia obtusa. Programa de Mestrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), 2020 atual; co-supervisor.

#### **EXPERTISE**

- Modelagem molecular: triagem virtual e design de drogas. docking molecular, modelagem farmacóforo, alinhamento de proteínas.
- Python (fundamentos);
- Data science (fundamentos);

### BACKGROUND

Trabalho no Laboratório de Produtos Naturais (Farmacognosia) da Universidade Federal do Espírito Santo (UFES - BR), integrando as áreas experimental e teórica. Atuo no desenvolvimento de modelos de interações proteína-ligante para estudar o potencial de ligação de compostos desejados por docking molecular, farmacóforo, para uma proteína de interesse. Uma vez que os modelos são desenvolvidos, eles podem ser usados em campanhas de Busca Virtual para recuperar novas moléculas com potencial de atuação em um determinado alvo. Quando um composto é obtido em pequenas quantidades (um dos gargalos da área de produtos naturais), utilizo a abordagem de identificação de alvos para identificar alvos potenciais para essa molécula (O caminho contrário). O workflow de modelagem molecular atua principalmente integrando métodos in silico, in vivo e in vitro, proporcionando uma pesquisa mais ampla em seu espectro de atividade. Tenho experiência em Sistemas Operacionais Linux (instalação, configuração, desenvolvimento de distro Linux) e linguagem de programação bash-scripting e python voltada para modelagem molecular. Atualmente, estou expandindo o aprendizado de python e ciência de dados para aplicar ao processo de descoberta de medicamentos.

# LISTA DE PUBLICAÇÕES

- 1. MINOZZO, B. R.; ANDRADE, E. A.; VELLOSA, J. C. R.; LIPINSKI, L. C.; FERNANDES, D.; NARDI, G. M.; **RODRIGUES, R. P.**; KITAGAWA, R. R.; GIRARD, C.; DEMOUGEOT, C.; BELTRAME, F. L. Polyphenolic compounds of *Euphorbia umbellata* (Pax) Bruyns (Euphorbiaceae) improved endothelial dysfunction through arginase inhibition. PHYTOTHERAPY RESEARCH., v.35, p.2557 2567, 2021.
- NETO, X. A. O.; ALVES, A. C. S.; JUNIOR, R. A. D.; RODRIGUES, R. P.; LANCELLOTTI, M. A. WANDA; KAWANO, D. F. Molecular docking reveals the binding modes of anti-cancer alkylphospholipids and lysophosphatidylcholine within the catalytic domain of CTP:phosphocholine cytidyltransferase (CCT). EUROPEAN JOURNAL OF LIPID SCIENCE AND TECHNOLOGY, v.122, 1900422-1900434, 2020.
- **3.** CARVALHO, S. G.; CIPRIANO, D. F.; FREITAS, J. C.; JUNIOR, M. S.; OCARIS, E. Y.; TELES, C. G.; JESUS G., A.; **RODRIGUES, R. P.**; ZANINI, M. S.; VILLANOVA, J. O. Physicochemical characterization and *in vitro* biological evaluation of solid compounds from furazolidone-based cyclodextrins for use as leishmanicidal agents. DRUG DELIVERY AND TRANSLATIONAL RESEARCH, 2020.
- **4.** BORGES, A. S.; MINOZZO, B. R.; SANTOS, H.; ARDISSON, J. S.; **RODRIGUES, R. P.**; ROMÃO, W.; BORGES, W. S.; GONÇALVES, R. R.; BELTRAME, F. L.; KITAGAWA, R. R. *Plectranthus barbatus* Andrews as anti-*Helicobacter pylori* agent with activity against adenocarcinoma gastric cells. INDUSTRIAL CROPS AND PRODUCTS, v.146, 112207-112219, 2020.
- **5. RODRIGUES, R. P.**; ARDISSON, J. S.; GONÇALVES, R. R.; OLIVEIRA, T. B.; SILVA, V. B.; KAWANO, D. F.; KITAGAWA, R. R. Search for Potential Inducible Nitric Oxide Synthase Inhibitors with Favorable ADMET Profiles for the Therapy of *Helicobacter pylori* Infections. CURRENT TOPICS IN MEDICINAL CHEMISTRY, v.19, 2795-2804, 2020.
- **6.** MAXIMINO, S. C.; DUTRA, J.; **RODRIGUES, R. P.**; GONÇALVES, R. R.; MORAIS, B.; VENTURA, J. A.; SCHUENCK, R.; JÚNIOR, V. L.; KITAGAWA, R. R.; BORGES, W. S. Synthesis of Eugenol Derivatives and Evaluation of their Antifungal Activity Against *Fusarium solani* f. s *piperis*. CURRENT PHARMACEUTICAL DESIGN, v.26, 1532-1542, 2020.
- **7. RODRIGUES, R. P.**; BARONI, A. M.; CAROLLO, C. A.; DEMARQUE, D.; PARDO, L. L.; REZENDE, L.; SANTOS, F. L.; LIMA, WILLIAM G.; SIQUEIRA, J. M. Synthesis, phytotoxic evaluation and *in silico* studies for the development of novel natural products-inspired herbicides. BIOCATALYSIS AND AGRICULTURAL BIOTECHNOLOGY, v.24, 101559-101569, 2020.
- **8.** BITTENCOURT, M. F.; **RODRIGUES, R. P.**; KITAGAWA, R. R.; GONÇALVES, R. R. The gastroprotective potential of silibinin against *Helicobacter pylori* infection and gastric tumor cells. LIFE SCIENCES, v.256, 117977-117986, 2020.
- **9.** MONTEIRO, J. R. B.; ARDISSON, J. S.; ATHAYDES, B. R.; GONÇALVES, R. R.; **RODRIGUES, R. P.**; KUSTER, R. M.; KITAGAWA, R. R. Anti-*Helicobacter pylori* and Anti-inflammatory Properties of *Eugenia uniflora* L.. BRAZILIAN ARCHIVES OF BIOLOGY AND TECHNOLOGY (ONLINE), v.62, 19180285-19180299, 2019.
- **10.** MASCARENHAS, R. M. G.; LIMA, C. A.; **RODRIGUES, R. P.**; KITAGAWA, R. R.; FARAONI, A. S.; OLIVEIRA, T. B. Evaluation of general toxicity in food constituents using *in silico* tools In *REVISTA VIRTUAL DE QUÍMICA*, v.11 (2), 543-553, 2019.

- 11. ATHAYDES, B. R.; ALVES, G. M.; ASSIS, A. L.; GOMES, J, v.; RODRIGUES, R. P.; CAMPAGNARO, B.; NOGUEIRA, B, v.; SILVEIRA, D.; KUSTER, R. M.; PEREIRA, T. C.; KITAGAWA, R. R.; GONÇALVES, R. R. 2019. Avocado seeds (*Persea americana* Mill.) prevents indomethacin-induced gastric ulcer in mice In FOOD RESEARCH INTERNATIONAL, v.119, 751-760.
- **12.** FIORI-DUARTE, A. T.; **RODRIGUES, R. P.**; KITAGAWA, R. R.; KAWANO, D. F. 2019. Insights into the design of inhibitors of the urease enzyme: a major target for the treatment of Helicobacter pylori infections In CURRENT MEDICINAL CHEMISTRY, v.26, 1-15, 2019.
- **13.** ARDISSON, J. S; GONÇALVES, R. R.; **RODRIGUES, R. P.**; KITAGAWA, R. R. 2018. Antitumour, Immunomodulatory activity and *in silico* studies of naphthopyranones targeting iNOS, a relevant target for the treatment of *Helicobacter pylori* infection In BIOMEDICINE & PHARMACOTHERAPY, v.107, 1160-1165, 2018.
- **14.** SCOTTI, M.; HERRERA-ACEVEDO, C.; OLIVEIRA, T.; COSTA, R.; SANTOS, S.; **RODRIGUES, R. P.**; SCOTTI, L.; COSTA, F. SistematX, an Online Web-Based Cheminformatics Tool for Data Management of Secondary Metabolites In MOLECULES, v.23, 103-123, 2018.
- **15.** DAMASCENO, J. P.; **RODRIGUES, R. P.**; GONÇALVES, R. R.; KITAGAWA, R. R. 2017. Anti-*Helicobacter pylori* Activity of Isocoumarin Paepalantine: Morphological and Molecular Docking Analysis In MOLECULES, v.22, 786 799.
- **16. RODRIGUES, R. P.**; SILVA, C. T. Discovery of potential neurodegenerative inhibitors in Alzheimer's disease by casein kinase 1 structure-based virtual screening In MEDICINAL CHEMISTRY RESEARCH, v.26, 3274-3285, 2017.
- **17.** KAGAMI, L. P.; NEVES, G. M.; **RODRIGUES, R. P.**; SILVA, V. B.; EIFLER-LIMA, V. L.; KAWANO, D. F. Identification of a novel putative inhibitor of the *Plasmodium falciparum* purine nucleoside phosphorylase: exploring the purine salvage pathway to design new antimalarial drugs In MOLECULAR DIVERSITY, v.5, 9745 9764, 2017.
- **18.** NEVES, G.; KAGAMI, L.; **RODRIGUES, R. P.**; SILVA, V. B.; EIFLER-LIMA, V. L.; KAWANO, D. F. *In silico* design of new inhibitors of guanine phosphoribosyltransferase (GPRT) from *Giardia lamblia* as antiparasitic drug candidates In CURRENT DRUG DISCOVERY TECHNOLOGIES, v.14, 8 24, 2016.
- **19. RODRIGUES, R. P.**; ANDRADE, S. F.; MANTOANI, S.; EIFLER-LIMA, V. L.; SILVA, V. B.; KAWANO, D. F. Using Free Computational Resources To Illustrate the Drug Design Process in an Undergraduate Medicinal Chemistry Course In JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION, v.92, 827-835, 2015.
- **20.** VOLPINI, J; **RODRIGUES, R. P**; FEDERICO, L.; SILVA, C. Structure-Based Drug Design of Novel MARK-3 Inhibitors in Cancer In CURRENT BIOACTIVE COMPOUNDS, v.10, 131-138, 2014.
- **21. RODRIGUES, R. P.**; YOSHIDA, N. C.; SIQUEIRA, J. M.; CORREIA, R.; GARCEZ, W. S. An Azafluorenone Alkaloid and a Megastigmane from *Unonopsis lindmanii* (Annonaceae) In JOURNAL OF THE BRAZILIAN CHEMICAL SOCIETY, v.24(4), 529-533, 2013.
- **22. RODRIGUES, R. P.**; SILVA, C. T. Pharmacophore, Similarity and ADMET Screening of Casein Kinase 1 inhibitors in Alzheimer's Disease In CURRENT BIOACTIVE COMPOUNDS, v.9, 27-36, 2013.

**23. RODRIGUES, R. P.**; MANTOANI, S.; ALMEIDA, J.; PINSETTA, F. R.; SEMIGHINI, E.; SILVA, V. B.; SILVA, C. T. Virtual Screening Strategies in Drug Design In *REVISTA VIRTUAL DE QUÍMICA*, v.4, 739-776, 2012.

## CAPÍTULOS DE LIVRO

- 1. OLIVEIRA, M. G.; SOUZA, W. N.; **RODRIGUES, R. P.**; KAWANO, D. F.; BORGES, L. L.; SILVA, V. B. Pharmacophore mapping of natural products for pancreatic lipase inhibition in: ENGINEERING MATERIALS, 1 ed., Springer International Publishing, vol1., pp. 305-338, 2020.
- 2. SILVA, V. B.; KAWANO, D. F.; RODRIGUES, R. P.; MANTOANI, S. P.; ALMEIDA, J. R.; SEMIGHINI, E. P.; SILVA, C. T. Bioisosteric replacements in drug design in: NEW DEVELOPMENTS IN MEDICINAL CHEMISTRY, 1 ed., Bentham Science Publishers, vol.2, pp. 192-212, 2014.
- **3. RODRIGUES, R. P.**; ALMEIDA, J. R.; SEMIGHINI, E. P.; PINSETTA, F. R.; MANTOANI, S. P.; SILVA, V. B.; SILVA, C. T. Adme/tox predictions in drug design in: NEW DEVELOPMENTS IN MEDICINAL CHEMISTRY, 1 ed., Bentham Science Publishers, vol.2, pp. 192-212, 2014.