

## **Proposta de abertura de uma vaga MS-3 na área de Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos**

### **Justificativa:**

O tema de Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos sugerido para um concurso público no IFUSP pode ser considerado estratégico pois reflete uma tendência mundial de investimento em áreas correlatas à saúde humana e aos sistemas biológicos em escala molecular tanto na área acadêmica como na industrial. A importância da modelagem molecular em sistemas biológicos é devido a sua possibilidade em descrever relações entre estrutura molecular, energia e função em processos físico-químicos aplicados em diferentes temas como por exemplo: desenvolvimento de fármacos e vacinas, biologia estrutural, rotas metabólicas, etc., através do estudo de sistemas moleculares que vão desde pequenas moléculas à sistemas macromoleculares como as proteínas e sistemas supramoleculares auto-organizados como é o caso de micelas, lipossomos, membranas, DNA e RNA, entre outros. [1-6]

Atualmente existem várias técnicas experimentais que revelam informações importantes sobre sistemas biológicos. Os estudos teóricos nesta área entram para buscar compreender as principais interações moleculares que regem os sistemas biológicos e com isto buscar uma compreensão mais abrangente dos fenômenos físico-químicos, bioquímicos e biofísicos. Em particular, é possível destacar as simulações computacionais que vão desde um tratamento atomístico para sistemas em escala nanométrica até tratamentos *coarse grain* para sistemas que chegam a escala micrométrica. Adicionalmente, a sinergia entre o estudo de sistemas biológicos através de experimentos e modelagem molecular trás grande benefício para ambos campos de pesquisa, promovendo trabalhos de alto impacto e informações valiosas para muitas áreas diferentes das ciências da vida.

A área de Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos é uma área que ganhou grande visibilidade desde os anos 90 com o grande desenvolvimento computacional e cada vez mais tem apresentado grande relevância no cenário internacional. Esta relevância pode ser acompanhada nas publicações em revistas de alto impacto como as do grupo da Nature e Science, PNAS, do grupo da Royal Society e revistas especializadas dedicadas exclusivamente a este tema como Molecular BioSystems, Journal of Chemical Information and Modeling, Journal of Molecular Modeling, Journal of Biomolecules, etc. Adicionalmente, foi o tema do Prêmio Nobel de Química em 2013 para os profs. Martin Karplus (Químico), Michael Levitt (Bio-físico-químico) e Arieh Warshel (Bio-físico-químico) no desenvolvimento de métodos multi-escala para o estudo de sistemas químicos complexos.

A ideia deste concurso é de prospectar um profissional que seja capaz de trabalhar com os grupos de pesquisa já existentes no IFUSP, mas de que seja alguém com perfil de liderança em sua área e com potencial de crescimento no IFUSP. Esse novo docente do IFUSP encontrará ambiente favorável e poderá trazer contribuições importantes tanto para o projeto acadêmico institucional, quanto para a ampliação de formação integrada com áreas multidisciplinares da Universidade, como a biologia, as ciências biomédica e farmacêutica, a química, a medicina, etc. Além disso, há fortes conexões com competências de grupos de pesquisa atuantes no IFUSP, disciplinas optativas de pós-graduação que são ministradas atualmente com grande procura de alunos e que tem a adequada abrangência temática. O IFUSP tem tradição na parte experimental de física aplicada a sistemas biológicos e promove a formação

acadêmica diferenciadas de alunos. Entretanto na parte teórica que envolve modelagem molecular só tem um docente realizando pesquisa neste tema no DFGE (Profa. Kaline Coutinho). Desta forma, entendemos que a vinda de mais um pesquisador nesta área trará benefícios diretos e indiretos ao IFUSP, à USP e à comunidade em geral, e tem interesse estratégico para o IFUSP. Para um bom desenvolvimento da Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos no IFUSP é necessário formar uma massa crítica de pesquisadores teóricos que trabalham neste tema para além de desenvolver projetos de aplicações em colaborações com os grupos experimentais, possam trabalhar em desenvolvimentos teóricos de alto impacto para a área.

No Brasil tradicionalmente encontramos grupos de pesquisa que trabalham na área de Modelagem Molecular, mas grande parte destes grupos tem enfoque em Ciência dos Materiais focando em estudos de sólidos cristalinos ou amorfos e materiais porosos nano-estruturados ou enfoque na área de Física Atômica e Molecular focando em desenvolvimento de novos métodos e algoritmos para resolver a Equação de Schrödinger com mais precisão ou de forma mais rápida ou focando em aplicações de métodos quânticos altamente sofisticados em pequenas moléculas. No IFUSP temos alguns pesquisadores que trabalham na área de Modelagem Molecular nestas duas linhas mencionadas nos departamento FMT e FGE. Vale salientar que não tem no IFUSP pesquisador que se dedique a macroestruturas biológicas, com foco em proteínas (por exemplo, proteínas de membranas, que incluem transportadores e canais iônicos) e também de complexos protéicos, além de sua interação com seus pares (proteína-ligante, proteína-DNA, proteína-RNA, proteína-membrana, etc).

### **Sugestão de departamento:**

O Departamento de Física Geral é uma boa escolha para acolher um novo pesquisador na área de Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos, pois neste departamento existem grupos de pesquisa que trabalham em área correlata que propiciarão um excelente ambiente para colaboração científica e sinergia entre teóricos e experimentais. Os docentes que trabalham experimentalmente com sistemas biológicos no DFGE são: profa. Teresa Lamy (Titular), prof. Adriano Alencar (Associado) e prof. Leandro Barbosa (Doutor) e que trabalham em desenvolvimento teórico em área correlata a sugerida são: prof. Sylvio Canuto (Titular), prof. Marcio Varella (Associado) e profa. Carla Goldman (Associada).

### **Sugestão de disciplinas:**

- 4302111 - Física I,
- 4302401 - Mecânica Estatística e
- 4300315 - Introdução à Física Atômica e Molecular

### **Referências:**

- [1] R. W. Hockney, J. W. Eastwood, Computer Simulation Using Particles, McGraw-Hill, New York, 1981.
- [2] M. P. Allen, D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon, Oxford, 1987.
- [3] W. F. van Gunsteren, H. J. C. Berendsen, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 1990, 29, 992; Angew. Chem. 1990, 102, 1020.
- [4] D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulation, Academic Press, London, 1996.
- [5] M. Karplus, J. A. McCammon, Nat. Struct. Biol. 2002, 9, 646.
- [6] H. J. C. Berendsen, Simulating the Physical World: Hierarchical Modeling from Quantum Mechanics to Fluid Dynamics, Cambridge University Press, Cambridge, 2007.