

Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos

Proposta de área para novo curso no IFUSP

Revelância e Importância

- Área estratégica 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. No Brasil, a CAPES tem projeto estratégico na área de Biologia Computacional que aponta como fundamental a participação de Físicos e a formação de recursos humanos.
- Importância 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.

- Existem várias técnicas experimentais.
- Área jovem: 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 Mol. BioSys., J. Chem. Inform. and Model., J. Molec. Model., J. Biomol., etc.
- 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.
- Ainda existe necessidade de muito desenvolvimento teórico em métodos e algoritmos em Mecânica Quântica e Mecânica Estatística com as simulações computacionais em nível atomístico (escala nanoscópica) e *coarse grain* (escala microscópica).

Cenário no USP

- IF, IFSC e IQ com grandes grupos experimentais (IF: 2FAP, 2FEP e 4FGE mínimo) e pequenos grupos teóricos (IF: 1FGE).
- Sugestão de departamento: FGE
- Sugestão de disciplinas: Mecânica Clássica, Mecânica Estatística e Introdução a Física Atômica e Molecular.