

Proposta de abertura de uma vaga MS-3 na área de Modelagem Molecular: Desenvolvimento e Aplicações em Sistemas Biológicos e/ou Matéria Mole

Justificativa científica:

O tema de Modelagem Molecular que envolve desenvolvimento e aplicações em sistemas biológicos e/ou matéria mole, sugerido para um concurso público no IFUSP, pode ser considerado estratégico pois reflete uma tendência mundial de investimento em áreas correlatas à saúde humana, aos sistemas biológicos e ao desenvolvimento de novos materiais flexíveis como polímeros, filmes finos ou até mesmo moléculas ou agregados supramoleculares utilizados em soluções como catalizadores, combustíveis verdes, polímeros, nanopartículas, fármacos, compostos foto-ativos etc.

O estudo na escala molecular é de interesse tanto na área acadêmica como na industrial. A importância da modelagem molecular destes sistemas complexos 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 complexos como os sistemas biológicos e materiais moles. 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 à escala micrométrica e mais recentemente modelos que utilizam inteligência artificial para descrever as interações moleculares. Adicionalmente, a sinergia entre o estudo destes sistemas complexos através de experimentos e modelagem molecular trás grande benefício para ambos os 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 e Matéria Mole 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. Nesta década de 2020, esta área está passando por uma grande revolução com a utilização de aprendizado de máquina/inteligência artificial e com a necessidade de desenvolvimento de novos programas computacionais para a utilização de computação quântica. 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 de Física e Química 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.

Impacto da contratação no âmbito do IF:

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, engenharia, etc. Além disso, há fortes conexões com competências de grupos de pesquisa atuantes no IFUSP e 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 sistemas complexos (profs Rosângela Itri, Marcia Fantini, Cristiano Oliveira, Antonio Figueiredo, Erix Garces, Adriano Alencar, Leandro Barbosa) que promove a formação acadêmica diferenciadas de alunos. Entretanto na parte teórica que envolve modelagem molecular temos os profs Sylvio Canuto, Marcio Varella, Lucas Cornetta, Caetano Miranda, Luana Pedrosa, Marília Caldas e Helena Petrilli trabalhando em vários sistemas, porém em sistemas biológicos e/ou sistemas complexos em matéria mole só tem uma docente realizando pesquisa neste tema (Profa. Kaline Coutinho). Desta forma, entendemos que a vinda de mais um(a) pesquisador(a) 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 em Sistemas Biológicos e/ou Matéria Mole 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 departamentos FMT e FGE. Vale salientar que não tem no IFUSP pesquisador(a) 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 proteicos, além de sua interação com seus pares (proteína-ligante, proteína-DNA, proteína-RNA, proteína-membrana, etc).

Prognóstico de potenciais candidato:

Existem pelo menos 10 a 15 pesquisadores brasileiros bem formados que estão atualmente no exterior trabalhando em instituições de ensino e pesquisa de boa reputação nas Estados Unidos, Europa e Japão, aguardando concursos nesta área. Alguns destes pesquisadores são ex-alunos do IFUSP e outros formados em outras instituições brasileiras. Estes pesquisadores estão trabalhando em pesquisa de ponta que envolvem desenvolvimentos computacionais utilizando técnicas novas e modernas, poderão promover no IFUSP um grande impacto na formação dos alunos em nível de graduação e pós-graduação.

Viabilidade da execução de projeto na área de pesquisa:

Esta área é teórica e não é necessário infraestrutura de laboratório. A atual infraestrutura computacional é adequada para acomodar um(a) docente nesta área de pesquisa e a necessidade de computação de alto desempenho pode ser suprida com a utilização de centros computacionais do estado de São Paulo e do Brasil. Assim, a execução de projetos de pesquisa na área proposta é viável e factível.

Justificativa para atividades de ensino e cultura e extensão:

Um docente contratado na área proposta com formação em Física poderá contribuir ministrando disciplinas nos três cursos de graduação do IFUSP (Licenciatura, Bacharelado e Física Médica). Também terá condições plenas de ministrar a disciplina obrigatório da pós-graduação em Física do IFUSP e propor/ministrar disciplinas optativas que complementarão a formação dos alunos nas áreas de Física e suas interfaces com Química, Biologia, Farmácia, Computação e algumas Engenharias.

Com relação a atividades de extensão existem várias atividades que podem ser desenvolvidas que promovam uma melhor compreensão das moléculas e suas interações, e de processos biofísicos e físico-químicos, trazendo uma melhor compreensão da natureza e dos sistemas biológicos.

Sugestão de departamento:

O Departamento de Física Geral é uma boa escolha para acolher um novo pesquisador na área proposta, 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: profs. Adriano Alencar, Leandro Barbosa e Erix Garces e que trabalham em desenvolvimento teórico em área correlata a sugerida são: profs. Sylvio Canuto, prof. Marcio Varella e Lucas Cornetta.

Outros departamentos como FAP, FEP e FMT também têm grupos de pesquisa que podem colaborar com um(a) docente contratado nesta área proposta.

Sugestão de disciplinas para o concurso:

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

Docentes que apoiam a proposta:

Kaline Coutinho (DFGE)
Sylvio Canuto (DFGE)
Marcio Varella (DFGE)
Lucas Cornetta (DFGE)
Adriano Alencar (DFGE)

Erix Garces (DFGE)
Leandro Barbosa (DFGE)
Marilia Caldas (DFMT)
Luana Pedrosa (DFMT)
Rosangela Itri (DFAP)

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.