



Dr. Luis Agustín Olivares Quiroz

UACM / presidente de la División de Física Estadística y Termodinámica de la SMF

Título: Redes de aminoácidos $C\alpha$, medidas de centralidad y cadenas de Markov discretas para caracterizar sitios activos en enzimas biológicas.

Resumen. Uno de los retos actuales en el campo de la física biológica es la identificación de aquellos sitios donde una enzima se une a un sustrato a fin de inducir o inhibir una reacción bioquímica en particular. Estas regiones, conocidas como sitios activos (active sites) representan uno de los problemas actuales más interesantes dado que su localización y su funcionamiento es el resultado de una interacción molecular compleja entre todas las sub-unidades de la molécula. Asimismo, la identificación de estos sitios resulta de gran interés en el diseño de fármacos moleculares que inhiban o induzcan una reacción bioquímica particular. En esta plática discutiremos un modelo basado en la teoría de grafos y procesos estocásticos en cadenas de Markov discretas (cMd) para analizar tanto la conectividad como el flujo de información dentro de una red cuyos nodos representan cada uno de los carbonos $C\alpha$ de la estructura cristalográfica de la proteína. En particular discutiremos su aplicación de esta metodología a proteasas del virus del SARS-CoV2 las cuales juegan un papel central en el ciclo de replicación viral y son una punta de lanza actualmente en la investigación básica y biomédica en el desarrollo de fármacos antivirales.