



## **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.