

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos**

**XII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos**

Livro de Resumos

**São Carlos
2022**

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 12

Coordenadores

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Adonai Hilario

Arthur Deponte Zutião

Elisa Goettems

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

Jefter Santiago Mares

João Victor Pimenta

Julia Martins Simão

Letícia Martinelli

Lorany Vitoria dos Santos Barbosa

Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio

Natasha Mezzacappo

Paulina Ferreira

Vinícius Pereira Pinto

Willian dos Santos Ribela

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrandiono

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

(12: 10 out. - 14 out. : 2022: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por Adonai Hilario [et al.]. São Carlos: IFSC, 2022.

446 p.

Texto em português.

1. Física. I. Hilario, Adonai, org. II. Titulo

ISBN: 978-65-993449-5-4

CDD: 530

PG173

Redes de similaridade físico-química

REIS, Renan dos; COSTA, Luciano da Fontoura

renandosreiss@usp.br

A aplicabilidade de compostos químicos e biológicos na ciência e na indústria depende fortemente de suas propriedades físico-químicas. Por exemplo, características como estabilidade térmica ou massa molecular podem ser decisivas para que uma molécula possa ser produzida ou aplicada em processos industriais ou em tratamentos farmacêuticos. (1-2) Portanto, para auxiliar a triagem de compostos viáveis a aplicação tecnológica, torna-se interessante analisar como um grupo de moléculas, seja uma família de enzimas ou um grupo de ligantes terapêuticos, se desdobra em um espaço de características físico-químicas. Com esse objetivo, no presente trabalho, descrevemos como a metodologia de coincidência (3) pode ser empregada para construir redes de similaridade físico-química de compostos. A abordagem permite que sejam mapeados em nós de uma rede, e que as semelhanças físico-químicas de pares de compostos sejam representadas por ligações entre pares de nós. (3) A métrica de semelhança usada, o índice de coincidência (3), possui parâmetros que podem ser otimizados a fim de se obter uma estrutura de comunidades relevante para a aplicação das moléculas em estudo. Para exemplificar essa abordagem, analisamos um grupo de enzimas da família *Glycoside Hydrolase 13* (GH13) (1) e um grupo de moléculas pequenas do grupo ATC B, que possuem ação terapêutica no sangue e em órgãos hematopoiéticos. (2) As enzimas da família GH13 são ativas em carboidratos e possuem alto interesse biotecnológico. (1) Para otimização de redes de semelhança dessas enzimas, cada componente conectada das redes foi tratada como um cluster de enzimas, e os clusters produzidos foram otimizados para que melhor se ajustassem aos diferentes grupos de atividade catalítica da família GH13, resultando em uma rede cujos grupos de enzimas físico-quimicamente relacionados são altamente homogêneos. Já as redes das moléculas pequenas do grupo ATC B foram otimizadas para se obter alto grau de modularidade, resultando em poucos grupos cujas moléculas são altamente relacionadas entre si, facilitando a identificação de moléculas com perfis físico-químicos semelhantes. As redes de semelhança físico-química obtidas para ambos os casos permite avaliar subgrupos de compostos com propriedades desejáveis para diferentes aplicações, podendo ser aplicada para triagem de enzimas e ligantes.

Palavras-chave: Redes complexas. Biofísica. Biotecnologia.**Agência de fomento:** CAPES (88887.637015/2021-00)**Referências:**

- 1 MAAREL, M. J. E. C. et al .Properties and applications of starch-converting enzymes of the alpha-amylase family. *Journal of Biotechnology* ,v. 94, n. 2, p. 137–155, 2002.
- 2 MEANWELL, N. A. Improving drug candidates by design: a focus on physicochemical properties as a means of improving compound disposition and safety. *Chemical Research in Toxicology* ,v. 24, n. 9, p. 1420–1456, 2011.

3 COSTA, L. da F. Coincidence complex networks. **Journal of Physics: complexity**, v. 3, n. 1, p. 015012, 2022.