



Evento	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2020
Local	Virtual
Título	Benzazóis como potenciais sondas fluorescentes de DNA: Docking
Autor	GUILHERME SALDANHA HENKIN
Orientador	SIMONE CRISTINA BAGGIO GNOATTO

Benzazóis como potenciais sondas fluorescentes de DNA: Docking

Guilherme Saldanha Henkin; Simone Gnoatto

Faculdade de Farmácia – Universidade Federal do Rio Grande do Sul

O imageamento celular utiliza cada vez mais sondas fluorescentes. O principal problema delas é que as estruturas bioquímicas analisadas também apresentam fluorescência, gerando resultado insatisfatório. Uma alternativa para esse problema é o uso de moléculas que apresentem o fenômeno *Excited State Intramolecular Proton Transfer* (ESIPT), moléculas que ao serem fotoexcitadas tautomerizam, quando isso ocorre, a diferença entre o máximo de excitação e o máximo de fluorescência é extremamente elevada, obtendo-se melhores resoluções. Os benzazóis obtidos a partir da reação do ácido salicílico, antranílico e tiosalicílico com *o*-aminofenol, *o*-fenilenodiamina e *o*-aminotiofenol, que formam respectivamente os benzoxazóis, benzimidazóis e benzotiazóis, normalmente, possuem fluorescência. Esse trabalho tem como objetivo realizar um estudo *in silico* (*Docking*), de diversos benzazóis avaliando a afinidade desses pelo DNA, baseado em sua energia livre, além do modo de interação dos ligantes na biomolécula. O *Docking* foi realizado no *software* AutodockTools4.0, e a macromolécula utilizada foi o Dodecâmero de Dickerson-Drew. 45 moléculas foram avaliadas até o momento, obtendo-se 100 conformações por molécula, onde observa-se nos diferentes *clusters* de conformações apenas a interação com o bolsão menor (BM) e intercalação. Para validação do método, como referência para as moléculas propostas, foram realizados *Dockings* do DAPI (-8,29 kcal.mol⁻¹ BM; -7,05 kcal.mol⁻¹ de intercalação) e do Laranja de Acridina (-6,87 kcal.mol⁻¹ BM; -7,05 kcal.mol⁻¹ de intercalação). O 2-(2'hidroxi-5'amidinofenil)-6-amidinobenzimidazol (-7,95 kcal.mol⁻¹ BM; -7,35 kcal.mol⁻¹ de intercalação) e o 2-(2'hidroxi-5'-*N*-fenil-fenil)-5-dimetilaminobenzimidazol (-7,82 kcal.mol⁻¹ BM; -7,86 kcal.mol⁻¹ de intercalação) apresentaram nos dois locais de interação valores de energia menores que o Laranja de Acridina, e no bolsão menor, valores de energia livre menores que o DAPI. Além disso, o 2-(2'hidroxi-5'amidinofenil)-5-dimetilaminobenzoxazol obteve valores de energia iguais aos do Laranja de Acridina em ambos os locais de interação. Por fim, outras moléculas estão sendo avaliadas, selecionando-se as mais promissoras para posteriormente realizar a Dinâmica Molecular, e futura síntese.