



Evento	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2020
Local	Virtual
Título	Métodos computacionais no estudo das interações ligantes-proteínas em sistemas de interesse medicinal
Autor	EDUARDO RAMIRES KUHN
Orientador	PAULO AUGUSTO NETZ

Métodos computacionais no estudo das interações ligantes-proteínas em sistemas de interesse medicinal.

Os métodos computacionais no desenho racional de fármacos permitem complementar resultados experimentais e prever possíveis fármacos. Um dos métodos utilizados é a docagem molecular, que simula a tendência de um ligante se ancorar em regiões de um receptor macromolecular. Uma aplicação importante é a interação entre um fármaco e uma proteína transportadora, como a albumina do soro bovino (BSA) usada por ser homóloga à albumina do soro humano (HSA), com custo inferior. Ambas são proteínas fluorescentes, e a fluorescência da BSA é atribuída aos resíduos triptofano (TRP) TRP134 e TRP213. O objetivo desse projeto é através de docagem molecular ligante-proteína investigar interações das moléculas de interesse com regiões que contenham TRP da BSA, complementando estudos experimentais de laboratórios parceiros. As moléculas estudadas se dividem em 3 grupos: grupo N com 4 moléculas que variam entre a posição do naftil e com e sem metacrilato; grupo F que possui uma estrutura em comum com o N porém alterna entre diferentes grupos retiradores, ambos com centro quiral, o terceiro grupo é o de 3 híbridos lofinamida alterando o tamanho da cadeia. Após a construção e otimização das estruturas dos ligantes, e de posse também da estrutura cristalográfica da BSA submete-se os sistemas aos cálculos de docagem nos programas AutoDock 4.0 e Vina. A análise é feita visualmente levando em conta a posição do ligante, o escore da interação (quanto mais negativo mais favorável) e a as conformações. Para os grupos N e F quiralidade não foi relevante e houve uma tendência maior de escore no TRP213 e de conformação no TRP134. Para o grupo LOFINAS foi possível definir a preferência do ligante pela interação próxima do TRP213 tanto em energia e conformações.