



Evento	Salão UFRGS 2018: SIC - XXX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2018
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Métodos de energia livre no estudo da interação proteínas-ligantes
Autor	BRENDA BORGES XAVIER
Orientador	PAULO AUGUSTO NETZ

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL - UFRGS

Laboratório de Química Teórica e Computacional

Métodos de energia livre no estudo da interação proteínas-ligantes

Bolsista: Brenda Borges Xavier

Orientador: Paulo Augusto Netz

O presente projeto de iniciação científica tem como objetivo otimizar o desenvolvimento racional de fármacos analisando os diferentes escores obtidos quando se usa métodos de cálculo e análise de energia livre distintos em um sistema Receptor-Ligante .

Os ‘alvos’, principais componentes do sistema, são os chamados receptores, as enzimas Monoamina Oxidases A e B. A importância biológica dos alvos citados está na abundância ou deficiência dos mesmos no corpo humano, o que pode causar doenças como Parkinson. Assim, a literatura descreve uma série de inibidores comprovadamente eficientes, chamados no âmbito do projeto, de ligantes, dentre estes podem ser mencionados derivados de naftoquinonas. Existem várias abordagens computacionais, que realizam a interação Receptor-Ligante, fornecendo determinados valores de energia livre, de acordo com seus respectivos métodos de cálculo. Para alcançar os objetivos estipulados para o projeto houve uma preparação do sistema de análise sob novas condições e uma atualização dos dados experimentais e computacionais, além da escolha de métodos para posterior comparação e conclusão de qual é melhor para determinados sistemas. Foram escolhidos o campo de forças AMBER (que pode ser comparado com simulações realizadas anteriormente com os mesmos sistemas usando o campo de força GROMOS) e o pacote de programas GROMACS. No presente momento estão sendo realizadas simulações clássicas de dinâmica molecular. A energia livre é um parâmetro de difícil estipulação e, ao mesmo tempo, é uma importante ferramenta na previsão de espontaneidade de reações. Do ponto de vista biológico, a energia livre é determinante na classificação de ligantes de acordo com seu grau de inibição em relação aos receptores. Desta forma, é essencial conhecer e estudar como diferentes análises abordam o cálculo de energia livre e escolher qual é o melhor para específicos sistemas com determinadas características.