



**Universidade:  
presente!**

**UFRGS**  
PROPEAQ



**XXXI SIC**

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2019
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Docking molecular com a proteína BSA e os ligantes tianeptina e seus ésteres derivados
<b>Autor</b>	DANIEL BALDIN FRANCESCHINI
<b>Orientador</b>	PAULO AUGUSTO NETZ

TÍTULO: Docking molecular com a proteína BSA e os ligantes tianeptina e seus ésteres derivados

AUTOR: Daniel Baldin Franceschini

ORIENTADOR: Paulo Augusto Netz

INSTITUIÇÃO: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Em um projeto em parceria com um grupo de pesquisa em Síntese Orgânica, desejava-se observar a extinção de fluorescência de uma proteína albumina presente no soro bovino BSA (PDB ID: 4OR0), com semelhança sequencial e estrutural de 70% em relação à análoga humana. Esta resposta de fluorescência ocorreu quando foram adicionados ligantes derivados da tianeptina, um antidepressivo. Experimentalmente os resultados indicaram uma significativa redução na intensidade da fluorescência emitida pela proteína, porém a extinção da fluorescência pode ocorrer mediante dois mecanismos, estático ou dinâmico. No entanto, não havia como analisar em detalhe as interações e o mecanismo. Sabendo que a contribuição mais importante para a emissão de fluorescência da BSA é o resíduo triptofano e experimentalmente houve a diminuição da intensidade, partiu-se para uma análise qualitativa por docking molecular.

Realizaram-se dockings com grids centrados nos resíduos triptofanos (TRP134 e TRP213) em triplicatas utilizando o software de docking molecular Vina e foram analisados os escores mais negativos. Visto que os parâmetros do software geram uma estimativa da entalpia e uma razoável estimativa da entropia do sistema podemos assumir que o score tem alguma relação com a energia livre de Gibbs, logo, quanto mais negativo o resultado mais estável é a interação.

A análise dos resultados permitiu concluir que o mecanismo predominante na extinção da fluorescência é o estático pois para a região do TRP213 os scores para essa região foram bastante negativos (implicando um complexo bastante estável) e mais favoráveis do que a região do TRP134. Além disso, há formação de ligação de hidrogênio com alguns resíduos na região do TRP213, assim pode-se assumir a formação de um complexo proteína-ligante mostrando que o mecanismo é predominantemente estático.

Este projeto resultou no artigo *Tianeptine Esters Derivatives: A Study of Protein-Drug Interaction Performed by Fluorescence Quenching and Molecular Docking* (DOI: 10.21577/0103-5053.20190090) para a revista *Journal of the Brazilian Chemical Society*.