



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2020
<b>Local</b>	Virtual
<b>Título</b>	PLANEJAMENTO E TESTE DE NOVAS MOLÉCULAS COM POTENCIAL INIBIÇÃO DA ECTO-5´-NUCLEOTIDASE
<b>Autor</b>	ADRIANO RONCHI SPILLERE
<b>Orientador</b>	ANA MARIA OLIVEIRA BATTASTINI

## PLANEJAMENTO E TESTE DE NOVAS MOLÉCULAS COM POTENCIAL INIBIÇÃO DA ECTO-5'-NUCLEOTIDASE

**Autor:** Adriano Ronchi Spillere

**Orientadora:** Ana Maria Oliveira Battastini

**Co-orientadora:** Vera Lucia Eifler-Lima

**Instituição de Origem:** UFRGS

**Justificativa:** Os quimioterápicos utilizados no tratamento oncológico exibem efeitos colaterais significantes, tornando o processo de recuperação do paciente desgastante. Além disso, tipos cancerígenos com alta infiltração não respondem de forma tão eficaz aos tratamentos vigentes. Dessa forma, faz-se necessário a pesquisa de novos fármacos mais eficazes e seguros para essa aplicação. A produção de adenosina no meio extracelular do microambiente tumoral proporciona imunossupressão das células imunes infiltradas e conseqüente progressão do tumor cancerígeno. Assim, reduzir a produção de adenosina pela inibição da enzima ecto-5'-nucleotidase (5'-NT, CD73), que promove a hidrólise de AMP, é uma opção para a busca de um novo quimioterápico, visto que esta enzima é superexpressa na maioria células tumorais.

**Objetivos:** os objetivos do presente estudo foram selecionar *in silico* e testar diferentes moléculas sobre a atividade da 5'-NT purificada. **Metodologia:** foram utilizados métodos *in silico* com base em modelagem molecular, através de protocolo de ancoramento molecular (*docking*) no complexo cristalográfico enzimático com um inibidor já conhecido, o AMPCP, utilizado como referência durante as análises. A predição de características físico-químicas também foi um ponto analisado. A proposta inicial foi avaliar uma série de 12 compostos selenados disponíveis na quimioteca do Laboratório de Síntese Orgânica Medicinal (LaSOM). A partir das análises *in silico*, os compostos mais promissores foram testados sobre a atividade da 5'-NT purificada no Laboratório de Sinalização Purinérgica (LabPur) a fim de avaliar seu potencial de inibição. **Resultados:** os testes enzimáticos mostraram que as moléculas testadas não foram capazes de inibir a enzima purificada. Assim, embora pudessem fazer interações positivas com o sítio ativo enzimático, as moléculas analisadas ainda precisam passar por melhoramentos com a adição de novos substituintes às suas estruturas. Em vista disso, faz-se interessante sintetizar e avaliar novos derivados para esse alvo.