

ANÁLISE IN SÍLICO DA INTERAÇÃO DE UMA MOLÉCULA ESTERÓIDE ISOLADA DA SECREÇÃO PAROTOIDE DE BUFONÍDEOS COM O RECEPTOR NICOTÍNICO DO SUBTIPO ALFA 7 VISANDO DESENVOLVIMENTO DE FÁRMACOS ANALGÉSICOS

Ciências Biológicas

SIQUEIRA, Fernanda Nathaly Dos Santos^{1,3}; OLIVEIRA, Rayan Maia^{2,4}; ZANCHI, Fernando Berton³; DIAS, Quintino Moura^{1,4}.

¹Centro Universitário São Lucas – Afya

²Faculdades Integradas Aparício Carvalho (FIMCA)

³Laboratório de Bioinformática e Química Medicinal – Fundação Oswaldo Cruz – Fiocruz RO

⁴Laboratório de Neuro e Imunofarmacologia (NIMFAR) – Fundação Oswaldo Cruz - Fiocruz RO

INTRODUÇÃO/OBJETIVO: A dor é uma manifestação fisiológica importante para informar o organismo da existência de um evento potencialmente danoso; no entanto, a dor pode se tornar enganosa e, dessa forma, ser prejudicial ao organismo. Isso leva a uma necessidade constante de novos fármacos e analgésicos, os principais disponíveis no mercado. Esses medicamentos apresentam reações adversas no organismo, principalmente riscos de dependência, tolerância e intoxicação. Estudos recentes mostram que os receptores nicotínicos subtipo alfa 7 representam um importante alvo para fármacos analgésicos em condições crônicas e inflamatórias. Nesse sentido, o objetivo do estudo foi avaliar in silico a interação de um esteroide derivado da secreção de glândulas e parotoide dos bufonídeos com os receptores nicotínicos do subtipo alfa contendo a subunidade alfa 7, visando o desenvolvimento de novos analgésicos para dor crônica e inflamatória. **MATERIAL E METODOS:** Para a realização do estudo, foram utilizados dois softwares, o Chimera e o PyRx. Inicialmente, o Chimera foi empregado para delimitar o sítio de ligação e modelar a estrutura. Em seguida, para realizar o ensaio de Dock e avaliar a capacidade da molécula de interesse em interação com o receptor, utilizamos o software PyRx. Como critério para determinar a eficiência da interação da molécula com o receptor, empregamos o parâmetro de Energia de Ligação. Comparamos a interação da molécula alvo com o receptor em relação à energia de ligação da interação da molécula padrão de controle, a lobelina. **RESULTADOS E DISCUSSÃO:** Os resultados mostram que a energia da ligação da lobelina com o sítio de ligação para o estudo foi de -8.58. Usamos como base a energia de ligação com um parâmetro e observamos que nossa molécula de interesse apresentou uma energia de ligação de -9.31. Dessa forma, os resultados indicam que nossa molécula demonstra uma interação eficaz, inclusive com uma eficiência maior do que a molécula de referência. **CONCLUSÃO:** Com base no resultado, podemos observar que o esteroide apresenta uma energia de ligação que sugere uma capacidade efetiva de interação com o receptor. Além disso, o valor sugere que nossa molécula de interesse tem uma capacidade de interação maior do que a molécula de referência. Isso levanta a possibilidade de que essa nova molécula possa ser explorada para desenvolver novos fármacos capazes de controlar condições em que essa proteína alvo tem participação nos mecanismos por exemplo da dor e da inflamação.

AGRADECIMENTOS: Centro Universitário São Lucas - Afya e Fundação Oswaldo Cruz pelo apoio institucional.

PALAVRAS CHAVES: Análise in silico; Receptor nicotínico subtipo alfa7; Fármacos analgésicos; Sítio de ligação

Email do autor apresentador: fernandasiqueira772@gmail.com

Email do orientador: quintino.dias@fiocruz.br