**AVALIAÇÃO IN SILICO DA INTERAÇÃO ENTRE MOLÉCULAS ESTRURALMENTE
SIMILARES A UM ESTEROIDE PRESENTE NA GLÂNDULA PAROTOIDE DE
ANUROS BUFONÍDEOS COM RECEPTOR COLINÉRGICO NICOTÍNICO SUBTIPO
7**

Ciências Biológicas

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

¹Faculdades Integradas Aparício Carvalho (FIMCA)

²Centro Universitário São Lucas – Afya

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

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

INTRODUÇÃO/OBJETIVO: O receptor nicotínico de acetilcolina (RN), em particular o subtipo alfa7, está amplamente distribuído ao longo do sistema nervoso e está envolvido com os aspectos fisiopatológicos da dor de origem neuropática e inflamatória. Evidências prévias mostram que esteroides obtidos de glândulas paratoides de bufonídeos apresentam efeitos analgésicos em modelo de dor inflamatória. Neste sentido, o presente estudo tem como objetivo avaliar *in silico* se esteroides obtidos de bufonídeos e substâncias estruturalmente análogas apresentam interação com receptores nicotínicos subtipo 7. **MATERIAL E METODOS:** A estrutura tridimensional resolvida do receptor nicotínico subtipo alfa 7 foi obtido no Protein Data Bank (PDB) (Berman et al., 2000) (<https://www.rcsb.org/>). Foram empregados como critério de seleção o método experimental, resolução do experimento de cristalografia e difração de raios-X (em Å), data de depósito mais recente, verificação de resíduos faltantes e presença de ligante complexado. A preparação da estrutura tridimensional para a realização do docking molecular foi realizado empregando o software UCSF Chimera (<https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>). Através do software UCSF Chimera foi definido a caixa de simulação (grid de busca), empregando a função zona, selecionando resíduos do receptor a um raio de 5 angstrom do ligante. Empregamos a molécula de Lobelina, no formato pdb, foi o ligante sendo complexado com receptor nicotínico para a definição do grid de busca. A estrutura 3D da lobelina ligada ao receptor nicotínico subtipo alfa 7 foi convertido ao formato pdbqt. No estudo, foi utilizado o software PyRx para realizar docking molecular e verificar os níveis de interação com base na energia de ligação entre as moléculas similares e o receptor nicotínico de acetilcolina alfa7, levando em consideração a energia de ligação da lobelina e um esteroide identificado como padrão de referência. **RESULTADOS E DISCUSSÃO:** Inicialmente o estudo obteve 375 moléculas similares dos quais 26 delas foram selecionadas com base nos melhores valores de energia de ligação. Foram considerados para o estudo moléculas com energia de ligação próximas a -8.58 e -9.31, obtidas de moléculas padrões. Os resultados mostram que o valor de energia de ligação das moléculas avaliadas variou entre -9.19 a -10.92. Desta forma, a maior parte das moléculas avaliadas apresentaram interação eficiente próxima as duas moléculas usadas como referência. **CONCLUSÃO:** A partir do desenvolvimento deste estudo foi possível concluir que as moléculas similares ao esteroide de anuro bufonídeo apresentaram energia de ligação relevantes

com o receptor, o que é considerado promissor para o desenvolvimento de potenciais novos fármacos analgésicos.

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

PALAVRAS CHAVES: Esteroides; Análogos químicos; Estudo in silico

Email do autor apresentador: rayanmaia000@gmail.com

Email do orientador: quintino.dias@fiocruz.br