

XVI REUNIÃO CIENTÍFICA SÃO LUCAS

De 30 de outubro à 1º de novembro

AUDITÓRIO UNIDADE II



DESENVOLVIMENTO DE APLICAÇÃO WEB PARA AUTOMATIZAR O PACOTE DE SOFTWARES DE DOCKING E PROSPECÇÃO DE NOVOS FÁRMACOS ANALGÉSICOS PARA O TRATAMENTO DA DOR CRÔNICA

PIRES, Bárbara Barbosa^{1,3}; OLIVEIRA, Rayan Maia^{2,3}; PASSOS, Tailane Gomes³; NOLETO, Thaiane Guterres³; ZANCHI, Fernando Berton⁴; DIAS, Quintino Moura^{1,3,5}

¹Centro Universitário São Lucas (Afya – UNISL), ² Centro Universitário Aparício Carvalho (FIMCA), ³ Laboratório de Neuro e Imunofarmacologia (NIMFAR) - Fundação Oswaldo Cruz (Fiocruz Rondônia), ⁴ Laboratório de Bioinformática e Química Medicinal - Fundação Oswaldo Cruz (Fiocruz Rondônia), ⁵Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Neuroimunomodulação - INCT-NIM

INTRODUÇÃO/OBJETIVO: De acordo com a International Association for the Study of Pain (IASP) a dor é definida como “experiência sensorial e emocional desagradável relacionada com dano tecidual real ou potencial, ou em condições que sugerem tal dano”. Assim, a dor é um processo biológico essencial para a sobrevivência pois se manifesta como um alarme quando o organismo é submetido danos reais ou potenciais, gerando respostas de esquiva ou de recuperação. Ao contrário da dor fisiológica, a dor patológica ou crônica não possui qualquer papel protetor, é normalmente mal-adaptada e deletéria ao organismo. A dor patológica é geralmente acompanhada de sinais semelhantes aos da depressão, tais como abatimento, anedonia e indiferença comportamental, normalmente desencadeada por eventos não adaptativos, tal como estresse inescapável. A lesão do sistema nervoso periférico ou central é um exemplo de evento mal-adaptativo que leva a um estado doloroso crônico conhecido por dor neuropática. De acordo com a IASP, a dor neuropática é definida como “a dor iniciada ou causada por lesão primária ou disfunção do sistema nervoso”. As neuropatias dolorosas normalmente estão associadas a dor persistente, dor paroxística espontânea, alodinia (condição em que estímulos normalmente inofensivos são percebidos como nociceptivos) e hiperalgesia (aumento da sensibilidade a estímulos nocivos). O docking molecular é uma técnica computacional essencial na descoberta de medicamentos, prevê como pequenas moléculas (ligantes) interagem com proteínas-alvo em nível atômico. Esta abordagem ajuda na compreensão do comportamento de pequenas moléculas dentro do sítio de ligação das proteínas e elucida processos bioquímicos fundamentais. Através do acoplamento molecular, os pesquisadores podem modelar

interações entre ligantes e proteínas, permitindo a identificação de novos compostos terapêuticos e a previsão de interações ligante-alvo. Este projeto propõe desenvolver a plataforma web denominada Painkillerdocking para automatizar o processo de docking molecular usando o AutoDock-GPU, focando na identificação de potenciais fármacos analgésicos contra a dor crônica. **MATERIAL E MÉTODOS:** Inicialmente será feito a instalação e compilação dos softwares necessários para o desenvolvimento do projeto, tais como CUDA e AutodockGPU e outras ferramentas auxiliares como Open Babel e MGLTools para converter formatos de arquivos moleculares e preparar as moléculas para simulações de docking. Após, identificaremos e selecionaremos as proteínas-alvo (receptores metabotrópicos, receptores ionotrópicos, canais iônicos voltagem-dependentes e enzimas: busca no Protein Data Bank) por alvos farmacológicos do tipo receptores e do tipo não-receptores envolvidos na fisiopatologia da dor crônica. Na sequência, desenvolveremos a parte interna do software, denominada de back-end, criando um ambiente virtual com Python e integrando o Django REST Framework para gerenciar informações. Automatizaremos o processo de preparação das moléculas e implementaremos um sistema de triagem virtual que avalia interações entre proteínas e ligantes, explorando o potencial de cada interação das proteínas no nosso banco de dados e os ligantes enviados pelo usuário. Por fim, construiremos uma interface gráfica amigável que permite aos usuários se cadastrarem, enviarem arquivos e visualizarem resultados de forma intuitiva. Essa abordagem rigorosa assegura que a plataforma seja eficiente e precisa, contribuindo significativamente para a pesquisa de novos fármacos analgésicos. **AGRADECIMENTOS:** Afya – Centro Universitário São Lucas; Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica – PIBIC 2024-2025.

PALAVRAS CHAVE: Dor crônica; Alvos farmacológicos; Analgesia.