



XXIX CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA (CIC)  
2019  
UACSA, UAST, UFAPE, CODAI e UEADTEC  
Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação  
Coordenação de Programas Especiais



## ESTUDOS DE RELAÇÃO ESTRUTURA ATIVIDADE E DOCKING MOLECULAR DE COMPOSTOS COM POTENCIAL ATIVIDADE ANTITUMORAL

Lucas Matheus de Souza Rodrigues<sup>1</sup>, Túlio Ricardo Couto de Lima Souza <sup>2</sup>  
E-mail: [tulio.couto@ufrpe.br](mailto:tulio.couto@ufrpe.br)

1 Universidade Federal Rural de Pernambuco – Unidade Acadêmica de Serra Talhada (UFRPE-UAST)  
2 Universidade Federal Rural de Pernambuco – Unidade Acadêmica de Serra Talhada (UFRPE-UAST)

O câncer é um termo que se refere ao conjunto de doenças causadas pelo crescimento celular desordenado, sendo uma das principais causas de morte no mundo. Embora a quimioterapia seja muito empregada para o tratamento do câncer o uso desse método ainda possui limitações e induz o surgimento de efeitos adversos, surgindo nesse contexto a necessidade de desenvolvimento de drogas mais eficazes. A descoberta de novos quimioterápicos anticancerígenos capazes de interagir com o DNA e inibir enzimas topoisomerases é destacada na pesquisa anticâncer. Os métodos computacionais de modelagem molecular como as técnicas de *docking molecular* têm se mostrado eficiente para prever a afinidade e orientação de ligação de compostos candidatos a fármacos com seus receptores biológicos. Logo esta pesquisa tem como objetivo avaliar teoricamente a interação de 8 derivados tiazóis, com a albumina bovina, e com a enzima DNA-topoisomerase e verificar algumas propriedades que afetam as características de absorção e distribuição dos compostos em estudo. O estudo *in silico* foi feito utilizando as plataformas pkCMS e SwissADME e o método de docking do algoritmo Lamarckiano. Como resultado de docking e análise das interações intermoleculares observou-se que os complexos albumina-ligante formados se dão principalmente por meio de interações hidrofóbicas e todos os ligantes se ligam próximos ao ambiente de triptofano. Os dados da investigação de docking sugerem que os ligantes possuem potencial de intercalação para formação de um complexo ternário com a topoisomerase II $\alpha$ , sendo os compostos **7d** e **7h** os que formaram complexos ternários mais estáveis, e por meio da análise das forças intermoleculares foi observado que eles interagem com os pares de bases do sítio de ligação. A estimativa das propriedades farmacocinéticas *in silico* indicaram de forma geral que os ligantes possuem boas características de absorção distribuição. A pesquisa mostrou uma estimativa do perfil farmacocinético dos ligantes em estudo e indicou que os ligantes podem ser sensíveis a ensaios de fluorescência com BSA. Além disso analisando o padrão de ligação dos 8 derivados, foi observado que pelo fato de possuírem sistemas aromáticos planares eles apresentam potencial para intercalar com o DNA e atuar como veneno de topoisomerase II.

**Palavras-chave:** Docking molecular, albumina, DNA, topoisomerase II, ligantes tiazóis, farmacocinética.

**Área do Conhecimento:** Ciências Exatas e da Terra.

Realização:



Apoio:



FUNDAÇÃO APOLÔNIO SALLES  
F A D U R P E