



Evento	Salão UFRGS 2018: SIC - XXX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2018
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Parametrização de anéis alifáticos presentes em fármacos para cálculos de mecânica molecular
Autor	GABRIEL COSTA MENEZES
Orientador	HUGO VERLI

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

Bolsista: Gabriel Costa Menezes

Orientador: Hugo Verli

Trabalho: Parametrização de anéis alifáticos presentes em fármacos para cálculos de mecânica molecular

Na elaboração de novos fármacos, alguns dos elementos mais utilizados se encontram na forma de anéis alifáticos. A conformação adotada por esses anéis contribui diretamente para a atividade de compostos bioativos frente à seus alvos moleculares. Embora tais preferências conformacionais sejam conhecidas experimentalmente, não há modelos de mecânica molecular capazes de reproduzi-la em complexos com os respectivos receptores-alvo. Neste contexto, o presente trabalho tem como objetivo desenvolver e validar parâmetros para descrever anéis de seis membros em cálculos de mecânica molecular empregando o campo de força GROMOS. Para tal, foram criadas topologias para anéis previamente descritos na literatura, empregando cargas atômicas e potenciais estacionais derivados de métodos quânticos do tipo MP2/6-31G empregando o programa Gaussian 09. A magnitude das barreiras rotacionais foi ajustada para cada molécula de forma a reproduzir a energia livre do equilíbrio entre as duas possíveis cadeiras de cada anel durante simulações por dinâmica molecular empregando o pacote GROMACS. O desenvolvimento de um método como esse abre um leque de possibilidades importantes no auxílio da determinação de qual anel deve ser escolhido durante a elaboração de fármacos, aumentando sua efetividade e reduzindo a presença de conformações que não participam de forma alguma em seu efeito terapêutico.