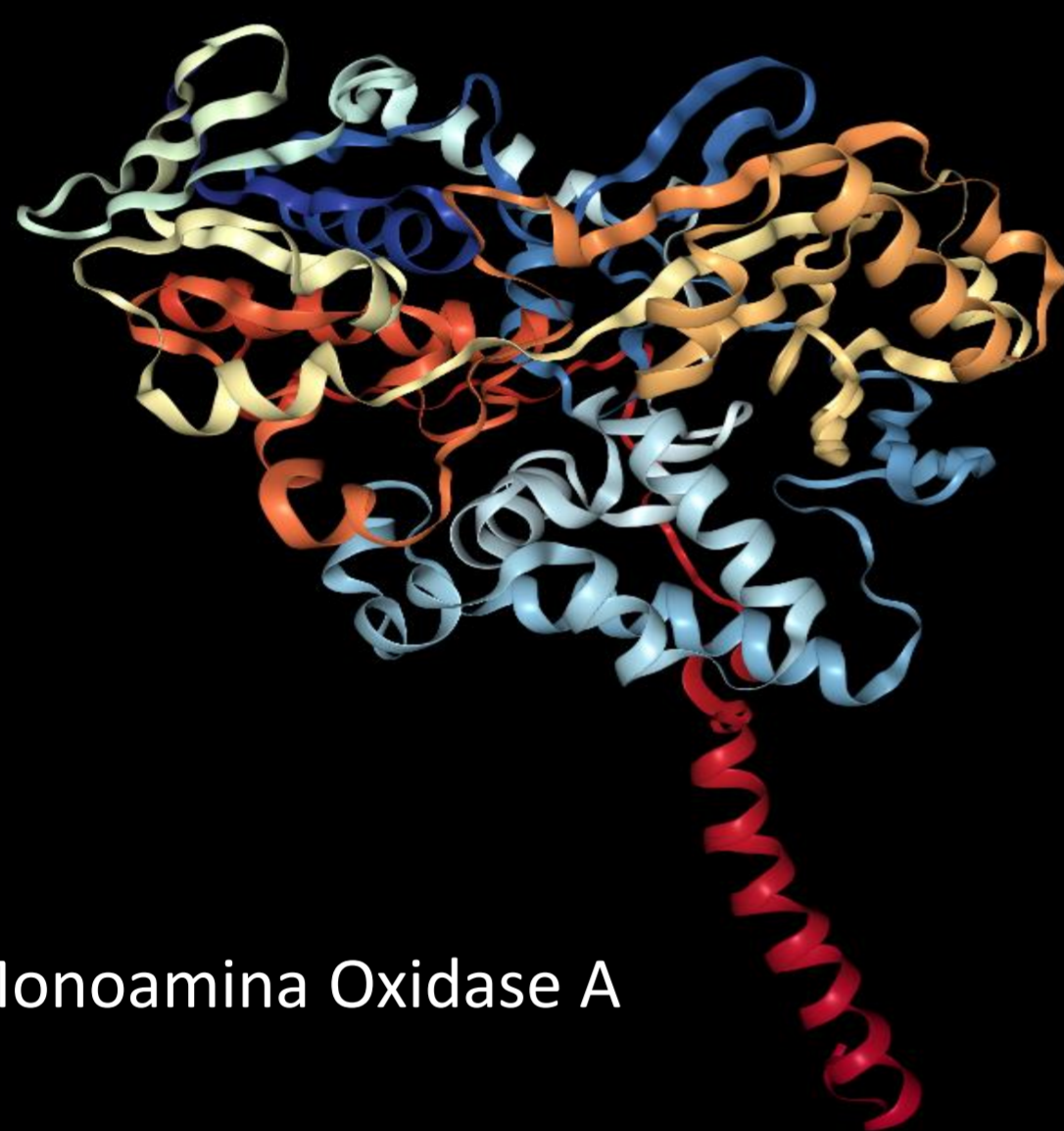


Métodos de energia livre no estudo da interação proteínas-ligantes

Brenda Borges, Paulo Netz

Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

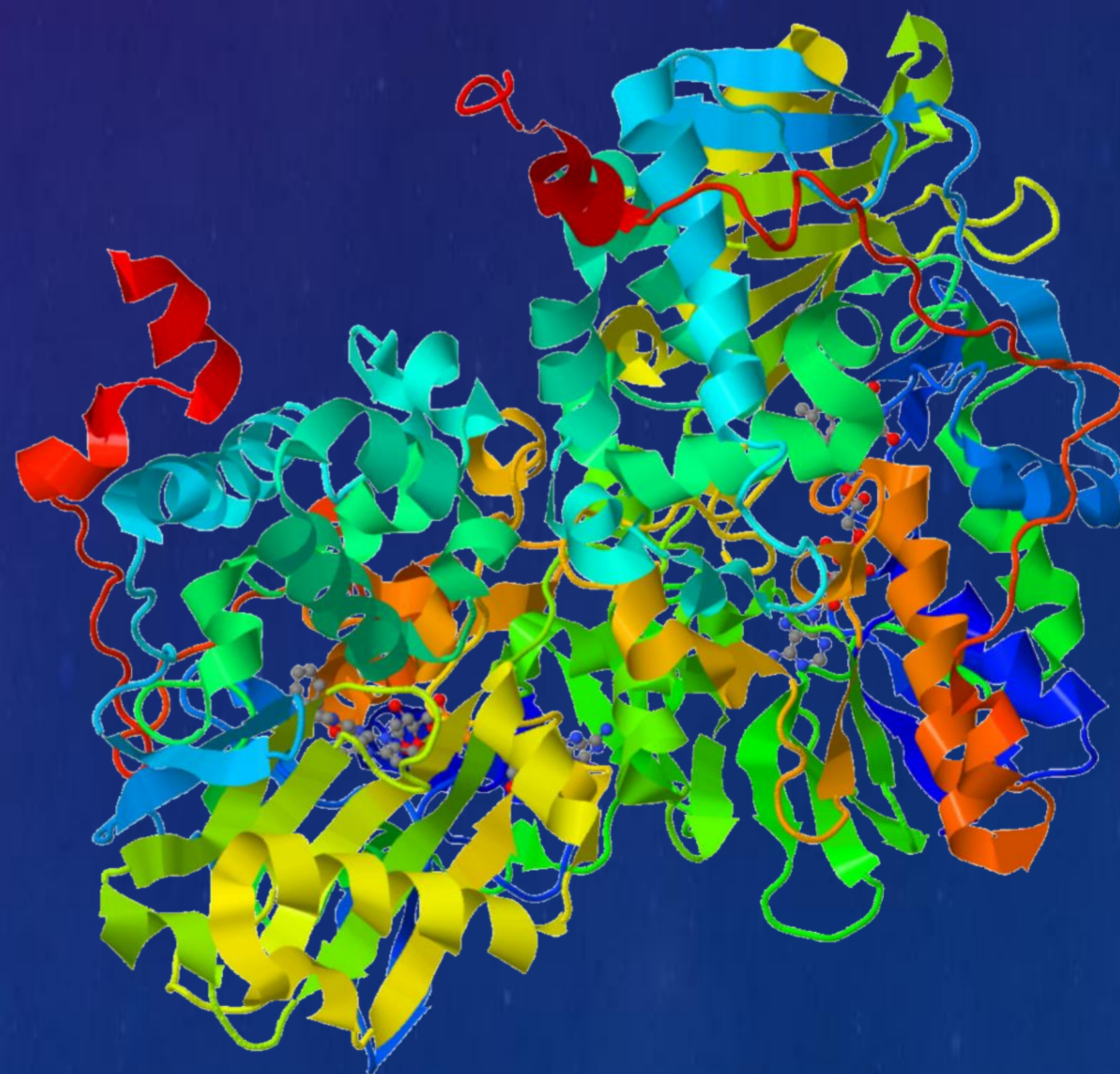


(a) Monoamina Oxidase A

Existem várias abordagens computacionais, que realizam a interação Receptor-Ligante, fornecendo determinados valores de energia livre, de acordo com seus respectivos métodos de cálculo. O presente trabalho deseja realizar uma comparação e concluir qual é melhor método para determinados sistemas. Foram escolhidos o campo de forças AMBER (que pode ser comparado com simulações realizadas anteriormente com os mesmos sistemas usando o campo de força GROMOS) e o pacote de programas GROMACS.

O projeto tem como objetivo otimizar o desenvolvimento racional de fármacos analisando os diferentes escores obtidos quando se usa métodos de cálculo e análise de energia livre distintos em um sistema Receptor-Ligante.

Os 'alvos', principais componentes do sistema, são os chamados receptores, as enzimas Monoamina Oxidases A e B [1]. A importância biológica dos alvos citados está na abundância ou deficiência dos mesmos no corpo humano, o que pode causar doenças como Parkinson.



(b) Monoamina Oxidase B

Referências:

- [1] – (a) <http://www.rcsb.org/3d-view/2z5x> . Consulta em agosto 2018
(b) <https://www.rcsb.org/structure/1GOS> . Consulta em setembro de 2018