

# Estudos Comparativos Acerca de Resultados Obtidos por Diferentes Softwares de Docking Molecular para as Proteínas Monoamino-Oxidase e Ligantes

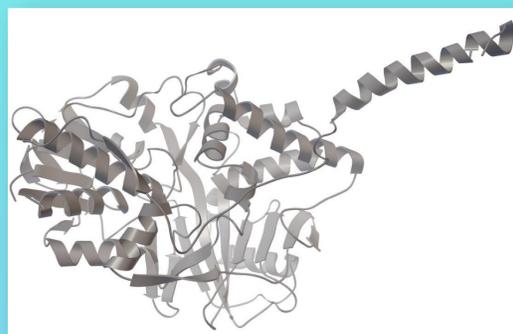
Instituto de Química – Laboratório de Química Teórica  
 Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Bolsista: Gabriel A. de Souza

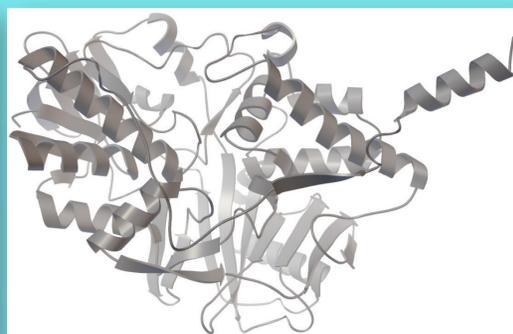
Orientador: Paulo A. Netz

## Introdução

O projeto consiste em analisar e comparar os resultados obtidos para os dockings de 11 ligantes para com as proteínas Monoamino-oxidase tipo A (MAO A) e tipo B (MAO B), utilizando diferentes softwares de docagem molecular.



MAO A



MAO B

## Objetivos

- ✓ Verificar se existe convergência de resultados para a posição predita para cada ligante.
- ✓ Observar se há uma região na qual a frequência de conformações docadas é majoritária, e compará-la com a região de sítio ativo das proteínas.

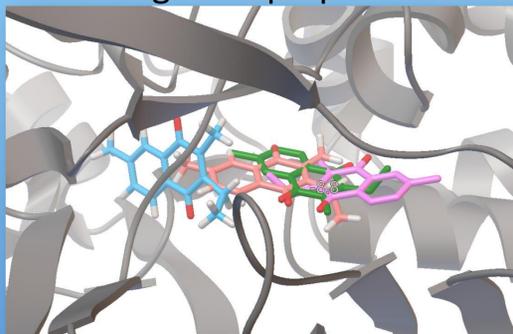
## Metodologia

Os softwares utilizados foram o AutoDockVina, AutoDock 4.0 e DockThor. Cada programa trabalha com entradas e parâmetros diferentes entre si, bem como levam tempos variados para calcular seus resultados. Após a preparação dos arquivos de entrada, executaram-se os dockings e analisaram-se os resultados.

## Resultados

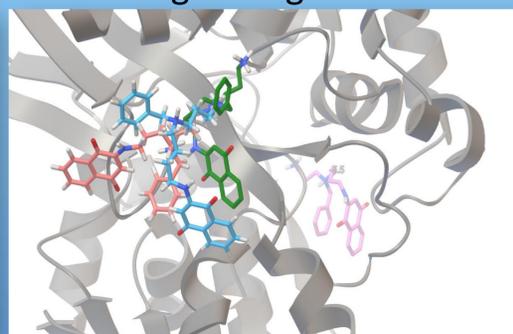
Observou-se uma concordância de posições preditas para os dockings que possuíam ligantes pequenos e rígidos, enquanto ligantes maiores e flexíveis tenderam a apresentar uma maior discrepância entre as posições preditas por cada programa.

Ligantes pequenos



2-etil-3,6-dimetilnaftoquinona  
com MAO A

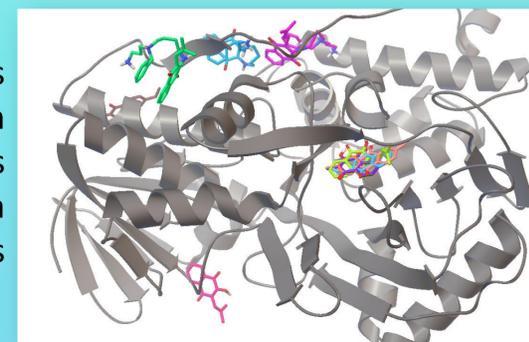
Ligantes grandes



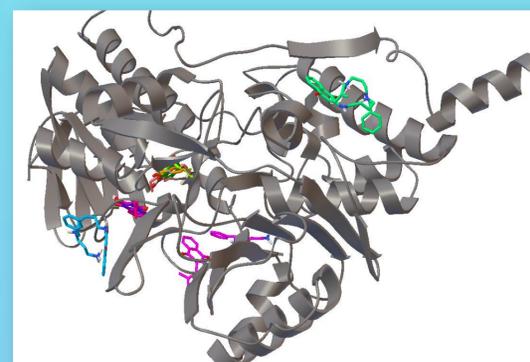
B2 com MAO A

Analisando as conformações de todos os ligantes simultaneamente, constatou-se que existe uma região dentro de cada proteína na qual há uma grande concentração de conformações preditas.

Entre as conformações calculadas pelo software AutoDockVina, foram encontrados 7 dos 11 ligantes dentro da proteína MAO A. Para a MAO B, foram encontrados 8 dos 11 ligantes dentro da proteína.



MAO A



MAO B

Entre as conformações calculadas pelo software AutoDock 4.0, foram encontrados 6 dos 11 ligantes dentro da proteína, para ambos os casos.

Entre as conformações calculadas pelo software DockThor, foram encontrados novamente 7 dos 11 ligantes dentro da proteína, para ambos os casos.



MAO A

## Conclusões

A análise dos resultados obtidos pelos três softwares mostrou-se coerente, pois, para a grande maioria dos ligantes foram previstas conformações dentro das proteínas. Além disso, observou-se que os ligantes que foram alocados fora das proteínas eram os mesmos para todos os softwares.

## Agradecimentos

À orientação de Paulo A. Netz, ao suporte fornecido pelos membros do Grupo de Química Teórica e aos órgãos de fomento à pesquisa.