

Saponinas são glicosídeos compostos por uma cadeia sacarídica e uma aglicona policíclica que apresentam diversas atividades biológicas, tais como antinociceptiva e antitumoral. A interação desses ligantes com seus receptores-alvo depende da conformação adotada pelas saponinas em solução. Nesse contexto, a estrutura tridimensional desses compostos é geralmente determinada em solventes não-aquosos, tais como piridina, que não correspondem ao ambiente fisiológico. Dessa forma, o presente trabalho busca avaliar aspectos relacionados à conformação, flexibilidade e interação de saponinas com uma solução de piridina, através de simulações de dinâmica molecular (DM), em comparação com tais parâmetros em soluções aquosas, a fim de avaliar a capacidade da metodologia em reproduzir dados conformacionais prévios de RMN e para propor modelos conformacionais para esses compostos em condições similares ao ambiente fisiológico. A conformação das saponinas foi inicialmente avaliada a partir de mapas de contorno para suas ligações glicosídicas, sendo refinada através de simulações de DM em solução, utilizando o campo de força GROMOS96 e o pacote de simulação GROMACS. Os resultados obtidos mostram-se de acordo com dados prévios de NOESY, permitindo a caracterização da geometria e flexibilidade dos compostos estudados. Da mesma forma, as interações entre soluto e solventes puderam ser caracterizadas, destacando as diferenças de solvatação entre os ambientes aquoso e não-aquoso. Estes dados demonstram a capacidade das simulações de DM em descrever e prever a conformação de glicoconjugados, contribuindo para a compreensão da estrutura e da função de compostos bioativos.