

## APLICAÇÃO PRÁTICA DAS INTERAÇÕES INTERMOLECULARES ENTRE BIOMACROMOLÉCULAS E LIGANTES PELO *LIGAND EXPLORER*

Alex Gutterres Taranto\* (PQ) Moacyr Comar Jr (PQ)  
taranto@ufs.br

Laboratório de Modelagem Molecular, Universidade Federal de São João del-Rei (UFSJ), Campus Centro Oeste (CCO), Divinópolis, Minas Gerais, Brasil

Palavras Chave: PDB, Interações Intermoleculares, Química Farmacêutica Medicinal.

### Introdução

O *Protein Data Bank* (PDB)<sup>1</sup> é o um banco de dados de estruturas tridimensionais de biomacromoléculas obtidas por métodos experimentais, tais como cristalografia de raios-X e ressonância magnética nuclear (RMN). Estas biomacromoléculas são alvos moleculares úteis para o processo racional de desenvolvimento de fármacos baseado na estrutura, pois se encontram complexados com o ligante, cujas interações intermoleculares entre ele e o alvo molecular podem ser estudadas através do programa *Ligand Explorer* disponibilizado pelo PDB. O presente trabalho teve como objetivo mostrar como o *Ligand Explorer* pode ser aplicado em aula expositiva para explicar o processo de reconhecimento molecular entre o ligante e o receptor. Dessa forma, a estrutura cristalina da enzima conversora de angiotensina (ECA) complexada com captopril (código PDB: 2X8Z<sup>2</sup>) foi utilizada para exemplificar as interações de reconhecimento molecular.

### Resultados e Discussão

Como resultado, o estudante pode observar que o captopril interage com a ECA através de ligação hidrogênio com os aminoácidos Gln265, His337, His497, Tyr504, interações hidrofóbicas com His367, Phe441, His497 e Tyr507 e uma interação

eletrostática Lys495. Em destaque, o *Ligand Explorer* também é capaz de mostrar a interação entre o íon de zinco e o grupamento tiol com uma distância de 2,13 Å (Fig. 1).

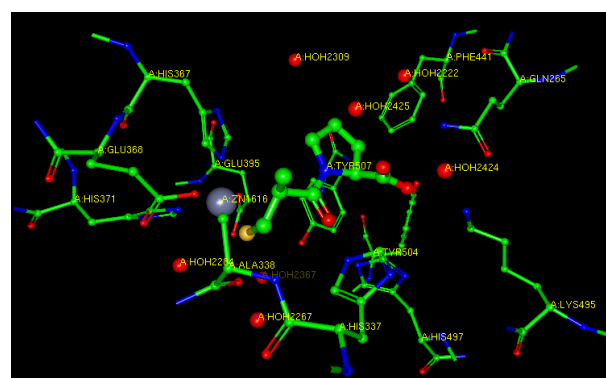


Figura 1. Sítio ativo da ECA gerado pelo *Ligand Explorer*.

### Conclusões

Estes resultados mostram como o conhecimento das interações intermoleculares e suas aplicações podem auxiliar o estudante no contexto de desenvolvimento racional de fármacos. O *Ligand Explorer* é, portanto, um recurso visual e educativo para a aprendizagem e compreensão dos dados que PDB oferece podendo ser aplicado ao conteúdo de Química Farmacêutica Medicinal.

### Agradecimentos



<sup>1</sup> Rose, P. W. *Nucl. Acids Res.* **2013**, 41 (D1), D475.

<sup>2</sup> Akif, M. *J.Mol.Biol.* **2010**, 400, 502.