

**Docagem molecular da enzima superóxido dismutase do nematode  
*Caenorhabditis elegans* com o nanomaterial- Ffulereno (C<sub>60</sub>)**

**Fischer, Eduardo  
Cornetet, Luísa; Durruthy, Michael; Bürger, Marcos; Monsserat, José ; Werhli,  
Adriano ;**

**Machado, Karina S. (orientador)  
eduardovostrofischer@gmail.com**

**Evento: XXIV Congresso de Iniciação Científica.  
Área do conhecimento: Ciências Exatas e da Terra: Ciência da Computação.**

**Palavras-chave:** Docagem Molecular; Bioinformática;

## **1 INTRODUÇÃO**

O estudo e a produção A evolução dos nanomateriais e as presentes e emergentes tecnologias envolvendo-os, nos gerou trouxe a necessidade de métodos de avaliação toxicológica eficientes, velozes, éticos e confiáveis. Dadas estas necessidades, esse projeto realiza docagens moleculares para estudar a toxicidade de nanomateriais denanotubos de carbono. Neste segmento se analisou a interação da proteína superóxido dismutase (SOD) do nemátode *C. elegans* (PDB ID 3KBF) com um ligante, o nanomaterial fulereno.

## **2 REFERENCIAL TEÓRICO**

A Docagem Molecular, também conhecida como Acoplamento molecular, Ancoragem molecular ou "Docking", no campo da modelagem molecular, é um método que visa prever a melhor conformação/orientação de um ligante no sítio de ligação de uma proteína (receptor) para formar um complexo estável.

## **3 MATERIAIS E MÉTODOS (ou PROCEDIMENTO METODOLÓGICO)**

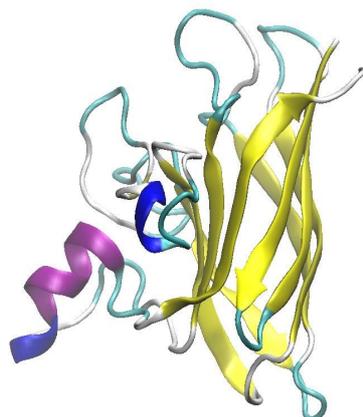
O Autodock Vina é uma ferramenta computacional "open source" de docagem molecular. Considerado um forte competidor dentre os outros programas de docagem molecular e também visto como um dos melhores em vários casos (Trott et al.,2010). A estrutura do receptor foi obtida no PDB (Berman et al.,2000). O framework utilizado foi proposto por Seus et. al.(2014).

## **4 RESULTADOS e DISCUSSÃO**

Todas as docagens foram executadas com a caixa no centro na molécula. No primeiro teste foi definida uma caixa de dimensão x=46, y=42, z=40 que gerou 9 resultados que geravam energias em média de -9.4 kcal/mol. Com dimensões x=56,

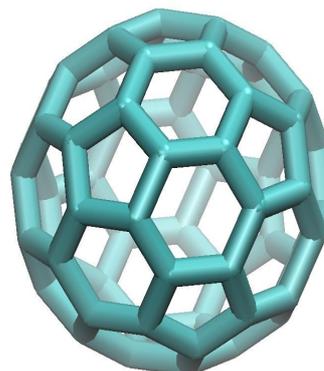
y=52, z=50, 9 resultados em média de -9.5 kcal/mol. Com x=32, y=32, z=32, 9 resultados com energia livre de ligação variaram entre -6.9 e -6.8 kcal/mol. Com dimensões x=22, y=22, z=22, a energia livre de ligação tornou-se positiva, indicando colisão entre átomos e assim assume-se que a caixa não é adequada.

Figura 1. SOD de *C. elegans*



Fonte: o autor

Figura 2. Fulereo



Fonte: o autor

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados de interação da proteína superóxido dismutase (SOD) do nemátode *C. elegans* com o nanomaterial fulereo são promissores, com energia livre de ligação de -6.8 a -9.5 kcal/mol. Como trabalhos futuros propõem-se a realização de experimentos com caixas de simulação variadas e com nanotubos de carbono com diferentes configurações.

## REFERÊNCIAS

Berman HM, Westbrook J, Feng Z, Gilliland G, Bhat TN, Weissig H, Shindyalov IN, Bourne PE: The Protein Data Bank Nuclid Acid Res (2000) Jan 1;28(1):235-42..

Seus, V. R. Um framework para triagem virtual. In: Trabalho de Conclusão de Curso em Sistema de Informação - Universidade Federal do Rio Grande. (2014)

Trott, A. J. Olson, AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization and multithreading, *Journal of Computational Chemistry* 31 (2010) 455-461