



UTILIZAÇÃO DE MÉTODOS MD/ MFCC PARA MODELAR A INTERAÇÃO INIBIDOR-ENZIMA NO TRATAMENTO DE DOENÇAS NEURODEGENERATIVAS

Mariely Ketheli Garcia de Queiroz¹, Nilton Ferreira Frazão²

RESUMO

Compreendemos que as doenças neurodegenerativas, como o mal de Alzheimer, até então, não existe cura. O mal de Alzheimer atinge especificamente áreas cognitivas do cérebro, onde causa de início perda de memória ocasionando uma diminuição do neurotransmissor acetilcolina. Portanto, Para elevar os níveis de Ach no cérebro, atualmente existem medicamentos que atuam como inibidores da enzima acetilcolinesterase, responsável pela degradação da acetilcolina. apresentando-se então que, o objetivo deste estudo é prever o padrão de ligação e quantificar a energia da interação entre o inibidor e a enzima através da estrutura 1UF8, sendo assim, realizado o Docking Molecular e o método de Fracionamento molecular com capuzes conjugados (MFCC). Os resultados obtidos pelo Docking Molecular foram de interações estáveis, enquanto os cálculos quânticos foram possíveis proceder uma análise mais quantitativa.

Palavras-chave: Doença Neurodegenerativa, Acetilcolinesterase, Docking Molecular.

¹ Aluna da Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Cuité, PB, e-mail: mariely.ketheli@estudante.ufcg.edu.br

² Doutor, Professor do Magistério Superior, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Cuité, PB, e-mail: nilton.ferreira@professor.ufcg.edu.br



UTILIZATION OF MD/MFCC METHODS TO MODEL THE INHIBITOR-ENZYME INTERACTION IN THE TREATMENT OF NEURODEGENERATIVE DISEASES

ABSTRACT

We acknowledge that neurodegenerative diseases such as Alzheimer's disease currently lack a cure. Alzheimer's disease specifically affects cognitive areas of the brain, initially causing memory loss and a subsequent decrease in the neurotransmitter acetylcholine. Therefore, in order to elevate Ach levels in the brain, medications acting as inhibitors of the acetylcholinesterase enzyme, responsible for acetylcholine degradation, are currently available. Hence, the objective of this study is to predict the binding pattern and quantify the interaction energy between the inhibitor and the enzyme using the 1UF8 structure. To achieve this, Molecular Docking and the Molecular Fractionation with Conjugate Caps (MFCC) method were employed. The Molecular Docking results revealed stable interactions, while quantum calculations allowed for a more quantitative analysis.

Keywords: Neurodegenerative Disease, Acetylcholinesterase, Molecular Docking