



USANDO O DOCKING REVERSO PARA ESTUDAR AS INTERAÇÕES ENTRE UMA MOLECULA ANTICANCER E PROTEÍNAS PRESENTES EM CELULAS CÂNCERIGENAS

Edwar Davila Montenegro

Área temática: Farmácia

INTRODUÇÃO: Este estudo aborda a pesquisa sobre a molécula QPhNO₂, destacando-se no campo da oncologia devido às suas promissoras propriedades anticancerígenas. A relevância da pesquisa reside na necessidade contínua de desenvolver terapias mais eficazes e específicas contra diferentes tipos de câncer, uma das principais causas de mortalidade global. **OBJETIVO:** Explorar as interações moleculares da QPhNO₂ com proteínas-chave no desenvolvimento do câncer, incluindo TP53, BCL-2, PTEN, BRAF e ABL, utilizando a técnica de docking reverso, para futuras aplicações em terapias anticancer.

METODOLOGIA: O estudo foi realizado em um ambiente laboratorial controlado, utilizando o software Spartan'14 para o desenho e otimização da estrutura molecular da QPhNO₂. Para a realização do docking reverso, empregaram-se os programas ArgusLab e Discovery Studio, que permitiram a simulação da interação da molécula com as estruturas tridimensionais das proteínas-alvo TP53, BCL-2, PTEN, BRAF e ABL. Estas estruturas proteicas foram obtidas de bancos de dados públicos de bioinformática. O protocolo de pesquisa incluiu a análise dos locais de ligação e a avaliação da afinidade molecular entre a QPhNO₂ e as proteínas estudadas. A validação dos resultados foi assegurada por meio de análises estatísticas e pela comparação com dados estruturais similares presentes na literatura científica. **RESULTADOS:** Os resultados do estudo revelaram que a molécula QPhNO₂ interage de maneira significativa com as proteínas-alvo TP53, BCL-2, PTEN, BRAF e ABL, envolvidas em processos cruciais de sinalização celular e regulação do crescimento tumoral. As análises de docking indicaram locais de ligação específicos que podem ser essenciais para os mecanismos de ação da QPhNO₂, sugerindo seu potencial terapêutico na modulação de vias de sinalização celular e na influência de processos como a apoptose e a proliferação celular desregulada, que são características marcantes das células cancerígenas. **CONSIDERAÇÕES FINAIS:** O docking reverso, proporcionou uma compreensão detalhada das interações entre a molécula e as proteínas-alvo TP53, BCL-2, PTEN, BRAF e ABL. As simulações computacionais sugerem que a QPhNO₂ apresenta locais de ligação específicos e afinidades moleculares promissoras com essas proteínas, que desempenham papéis fundamentais na regulação do crescimento tumoral e na apoptose. Essas descobertas abrem caminho para o desenvolvimento de novas abordagens terapêuticas que visam modular as vias de sinalização celular no tratamento do câncer, destacando o potencial da QPhNO₂ como um agente anticancerígeno inovador.

Palavras-chave: Docking Molecular, QPhNO₂, Drug delivery, nanocarreadores.