

# MODELAGEM MOLECULAR EM BIOTECNOLOGIA: UMA ASSOCIAÇÃO PODEROSA PARA O PLANEJAMENTO RACIONAL DE FÁRMACOS

Josivan da Silva Costa<sup>1</sup>

Karina da Silva Lopes Costa<sup>2</sup>

1. josivan.chemistry@gmail.com

2. karinalopesfarm@gmail.com

**Introdução:** A biotecnologia é uma ciência multidisciplinar que usa organismos vivos (ou partes destes) no desenvolvimento de produtos e processos para aplicação na melhoria da vida humana e do meio ambiente. Configura uma combinação de conhecimentos de áreas como a biologia, química, engenharia, entre outras. A aplicação da Modelagem Molecular (MM) em biotecnologia visa investigar, a partir de simulações computacionais, a atividade biológica, a estrutura, as propriedades, as interações de moléculas (fármacos) com receptores biológicos, além de apresentar possíveis efeitos colaterais ou tóxicos. **Objetivo:** Oferecer material científico que apresente a importância da MM e da biotecnologia associadas para o planejamento de fármacos. **Metodologia:** Neste estudo, foi utilizado o método de revisão da literatura. O termo “Biotecnologia” foi inserido na busca do DeCS/Mesh, apenas estudos dos últimos cinco anos e com uso de MM, foram selecionados. **Resultados e Discussão:** Um total de 31 estudos sobre a MM associada a biotecnologia foram obtidos. A MM envolve a criação de modelos computacionais para a representação de estruturas tridimensionais de moléculas e simulação das interações dessas moléculas com possíveis alvos biológicos. Nessa técnica, os modelos são construídos tendo como base de comparação, resultados experimentais sobre estruturas de moléculas e macromoléculas e obtidos em técnicas como cristalografia de raios-X e de Ressonância Magnética Nuclear, a RMN. Cita-se aqui, como exemplo de métodos de MM, (1) Programas para obtenção de descritores moleculares, como o GAUSSIAN; (2) webservidores de análises de propriedades farmacocinéticas e toxicológicas como o PREADMET e DEREK; (3) Programas de análises de Docagem Molecular (interações receptor-ligante), como o Autodock; e (4) Programas para análises de Dinâmica molecular (interação com o receptor biológico ao longo do tempo, como o NAMD. Outras técnicas adicionais como previsões de atividade biológica e construção de farmacóforo (região do fármaco responsável pela interação com o receptor), também podem ser utilizadas. As técnicas aqui expostas são geralmente utilizadas em conjunto, configurando uma metodologia conhecida como triagem virtual. Como são técnicas computacionais (*in silico*) que dispensam o uso físico de organismos e por possuírem alto grau de confiança estática (devido aos algoritmos utilizados), os programas de MM têm atribuído um abaixamento aos custos para obtenção de fármacos. **Considerações Finais:** A MM é utilizada em diversas áreas dentro da biotecnologia, o que tem permitido o desenvolvimento de novos medicamentos, de enzimas, previsões sobre interações entre moléculas e receptores biológicos, potencializando resultados na obtenção de novos medicamentos.

**Palavras-chave:** Medicamentos; Receptor-ligante; Design de fármacos.

**Área Temática:** TEMAS LIVRES EM FARMÁCIA.