Química

# ESTUDOS DE MODELAGEM MOECULAR DE INIBIDORES DA mTOR

Antônio Pedro Lemos de Mesquita - 8º período do curso de Química (Licenciatura Plena), UFLA, bolsista PIBIC/FAPEMIG. Contato: antonio.mesquita@estudante.ufla.br.

Elaine Fontes Ferreira da Cunha - Professora do Departamento de Química, UFLA. Contato: elaine_cunha@ufla.br; Orientadora. - Orientador(a)

**Resumo**

A proteína alvo da rapamicina em mamíferos, mTOR, trata-se de uma serina/treonina quinase com um importante papel no metabolismo proteico. Sua principal ação está no desenvolvimento e manutenção celular, além de ter atividade fundamental nos processos de anabolismo e hipertrofia muscular. A partir dos anos 2000, descobertas importantes foram feitas a respeito da regulação da mTOR no organismo de mamíferos e constatou-se que a hiperativação da proteína está atrelada ao surgimento de cânceres e outros tipos de tumores, além de ter sido demonstrado que a inibição farmacológica bloqueou a capacidade das células de se diferenciarem em adipócitos maduros, o que possibilita tratamentos para distúrbios metabólicos, como a obesidade. Um dos mais importantes avanços no planejamento e descoberta de novos fármacos tem sido a utilização de técnicas de modelagem molecular. Esta metodologia permite a construção de modelos químicos e/ou biológicos que permitem interpretar sistemas interrelacionados como, por exemplo, a interação fármaco-receptor, oferecendo um melhor direcionamento no processo de P&D de fármacos. Tendo em vista as possibilidades de estudos oferecidas pela modelagem molecular, o presente trabalho tem como objetivo realizar o ancoramento molecular (molecular docking) de 66 ligantes, já relatados na literatura como potenciais inibidores da mTOR, no sítio ativo da proteína, visando estudar as interações existentes entre eles. A partir desses cálculos, juntamente com os valores de concentração inibitória já determinados experimentalmente, é possível propor outras moléculas com potencial de inibir a mTOR.

Palavras-Chave: proteína, fármacos, inibidores.
Instituição de Fomento: FAPEMIG

Link do pitch: https://youtu.be/FVgaUyfFgfQ