

Química computacional contra HIV

Química

Enviado por: _fernandazacarias@seed.pr.gov.br

Postado em:09/04/2014

Química computacional propõe novas substâncias contra HIV Por Antonio Carlos Quinto Cientistas da USP estão utilizando métodos de química medicinal computacional para melhor compreender os mecanismos moleculares que estão envolvidos na inibição de uma enzima – HIV integrase – ligada à replicação do vírus HIV. O objetivo é propor novas substâncias químicas que seriam a base de novos medicamentos contra a doença. Os resultados desta pesquisa foram publicados na revista PLOS One em sua edição de janeiro deste ano. De acordo com a professora Káthia M. Honório, da Escola de Artes Ciências e Humanidades (EACH) da USP, a partir deste trabalho foi possível entender as principais características moleculares das substâncias em estudo e que estão relacionadas com a atividade biológica desejada. “Em um ou dois anos esperamos planejar, computacionalmente, novas substâncias que deverão ser sintetizadas e submetidas a testes biológicos”, acredita a docente, que foi coorientadora da pesquisa de doutorado de Luciana Luzia de Carvalho, defendida no Instituto de Química de São Carlos (IQSC) da USP, e que teve como orientador o professor Albérico B. F. da Silva. Para os testes biológicos, Káthia antecipa que irá contatar grupos de pesquisa que tenham experiência com o tema. A professora explica que a enzima HIV integrase é responsável pela integração do DNA viral no cromossomo-alvo do hospedeiro, sendo essa etapa fundamental para a replicação do vírus. “Em estratégias de Química Medicinal, um dos principais objetivos é propor novas substâncias químicas com o intuito de inibir a enzima HIV integrase de forma a impedir, eficazmente e com menores efeitos colaterais, a replicação do vírus”, descreve. Modelos computacionais Káthia conta que, para estudar um conjunto de substâncias químicas que apresentam atividade biológica frente à enzima HIV integrase, foram utilizadas as técnicas de QSAR 2D e 3D, que geram modelos computacionais que relacionam as propriedades bi e tridimensionais das substâncias químicas com a atividade biológica. “Por exemplo, a partir de um modelo de QSAR, podemos inferir que moléculas muito volumosas apresentam significativa atividade biológica e, a partir desse resultado, podemos planejar novos compostos levando essa característica em consideração”, explica. Além disso, a cientista ressalta que os métodos de acoplamento molecular (docking), também utilizados no estudo, fornecem informações sobre as principais interações entre os compostos e o sítio ativo da enzima. “Os métodos de docking realizam a simulação de cada substância dentro do sítio ativo do alvo e as moléculas que realizarem o maior número de contatos dentro do alvo biológico deverão apresentar a atividade biológica desejada.” O conjunto de substâncias estudado nesta pesquisa foi sintetizado e testado biologicamente por outros grupos de pesquisa. “Nós apenas construímos os modelos computacionais para entender quais propriedades químicas estão relacionadas com os dados de atividade biológica e, a partir desses resultados, entender o mecanismo de ação e propor modificações moleculares para obtenção de novas substâncias, candidatas a novos fármacos.” Esta notícia foi publicada em 03/04/2014 pelo site Agência USP de Notícias. Todas as informações contidas são de responsabilidade do autor.