



Não Queira
Ser Só, Quer
Ser
XII SEMANA
UNIVERSITÁRIA

Diversidade,
Inclusão e
Transformação Social

INVESTIGAÇÃO COMPUTACIONAL DA ANIDRASE CARBÔNICA IX NO CÂNCER DE MAMA POR DOCKING MOLECULAR

Herminda Milton¹
Eugênio Maurício²
Aluisio Marques Da Fonseca³

RESUMO

Introdução: O câncer de mama é uma doença complexa e ainda representa um grande desafio para a saúde. Por isso, diferentes estudos buscam identificar alvos moleculares que possam contribuir para o desenvolvimento de novas estratégias de tratamento. Entre esses alvos está a anidrase carbônica IX (CAIX) uma proteína relacionada à adaptação das células tumorais em ambientes com baixa disponibilidade de oxigênio e à regulação do pH. **Objetivo:** Este trabalho tem como objetivo investigar por meio de ferramentas computacionais a interação de potenciais ligantes com a CAIX utilizando o docking molecular. **Metodologia:** A investigação utiliza como referência a estrutura cristalográfica PDB 6NLV disponível no Protein Data Bank. Essa estrutura representa um modelo mimético de CAIX em complexo com o inibidor SLC-149 e apresenta resolução de 1,79 Å. A metodologia envolve a obtenção e preparação da estrutura proteica e a seleção na plataforma ZINC20 de compostos já testados para a anidrase carbônica IX. Após a obtenção desses compostos, serão preparados os ligantes definida a região de interesse e realizadas as simulações de docking molecular em seguida, o estudo analisará as poses dos ligantes, os valores de afinidade previstos e as principais interações com o sítio de ligação. O ligante presente na estrutura cristalográfica servirá como referência para a análise dos compostos investigados. **Resultados:** Como o estudo ainda está em desenvolvimento, a investigação busca identificar compostos que apresentem interações favoráveis com o alvo e que possam ser avaliados em estudos posteriores. **Conclusões:** Os resultados do docking molecular poderão contribuir para compreender melhor a interação entre os ligantes e a CAIX no contexto do câncer de mama. A apresentação deste trabalho na Semana Universitária contribui para a troca de conhecimentos e mostra a importância das ferramentas computacionais na pesquisa científica e na busca por novas possibilidades de investigação na área da saúde.

Apoio Financeiro: PIBIC

Agradecimentos: Agradecemos ao Professor Aluisio Marques da Fonseca pela orientação, incentivo e apoio durante a elaboração do presente trabalho, e à Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB), assim como aos integrantes do grupo de pesquisa pelo apoio e pelas contribuições para o desenvolvimento deste trabalho.

Grande área do CNPq: Ciências Exatas

Contribuição para o tema da SEMUNI - "Diversidade, Inclusão e Transformação Social": O trabalho contribui para o tema da SEMUNI ao apresentar o uso de ferramentas computacionais na investigação do câncer de mama, doença que afeta diferentes grupos da sociedade e representa um importante desafio para a saúde pública. A pesquisa também demonstra como a inovação científica pode ampliar as possibilidades de investigação e contribuir para a construção de conhecimentos voltados à saúde, à inclusão e à transformação social.

MBOGE, M. Y. et al. Inhibition of Carbonic Anhydrase Using SLC-149: Support for a Noncatalytic Function of CAIX in Breast Cancer. *Journal of Medicinal Chemistry*, v. 64, n. 3, p. 1713-1724, 2021. DOI: 10.1021/acs.jmedchem.0c02077.

RCSB PROTEIN DATA BANK. 6NLV: Selective inhibition of carbonic anhydrase IX activity, using compound SLC-149, displays limited anticancer effects in breast cancer cell lines. PDB ID: 6NLV.

Palavras-chave: câncer de mama; docking molecular; CAIX; PDB6NLV.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza - ICEN, Discente, hermindamilton9@gmail.com¹

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza - ICEN, Discente, mauricioeugenio167@gmail.com²

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza - ICEN, Docente, aluisiomf@unilab.edu.br³