

SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS NA HEMATOLOGIA

II Encontro de Iniciação Acadêmica

Jose Yuri Gomes da Silva, Valder Nogueira Freire

Caracterizada por manifestações clínicas agudas e crônicas e pelo comprometimento progressivo de órgãos e sistemas, a anemia falciforme é considerada uma doença multissistêmica, sendo uma doença genética com prevalência mundial elevada. A enfermidade é caracterizada por uma disfunção endotelial acentuada que pode ser decorrente de diversos fatores, estando os distúrbios no metabolismo da arginina relacionados ao estado crônico apresentado por esses pacientes. Quanto ao metabolismo, a arginase, uma enzima, catalisa a hidrólise da L-arginina em L-ornitina e ureia, estando localizada no citosol e sendo mais abundante no fígado, sendo o principal responsável pela destoxificação da amônia como ureia. O presente projeto divide-se em duas vertentes principais: Preparação Química e caracterização de nano sistemas Hidroxi-ureia@CaCO₃ e Hidroxi-Ureia@Ciclodextrina e simulações computacionais a nível estrutural envolvendo a arginase e outros ligantes, a fim de compreender quais ligantes interagem na cristalização e na interação da arginase com a arginina. Com as estruturas cristalográficas, torna-se possível o mapeamento do sitio ativo da enzima, sendo possível propor mudanças a fim de aumentar a interação dessas com o sitio ativo. Utiliza-se, para as simulações computacionais o aplicativo Pymol, que permite a visualização da proteína em sua forma tridimensional, bem como a identificação de seus aminoácidos, resíduos e ligantes, sendo possível realizar diversos testes com outras estruturas.

Palavras-chave: Arginase. Anemia Falciforme. Arginina. Hematologia.