

SIMULAÇÃO DE BIOINFORMÁTICA ENVOLVENDO POLÍMEROS NA FUNCIONALIZAÇÃO DE NANOPARTÍCULAS DE OURO PARA CONJUGAÇÃO COM ANTICORPOS VISANDO SUA APLICAÇÃO EM BIOSSENSORES

BRUNA FERRI SERAFINI; DUANE DA SILVA MORAES; GIOVANA DALPIAZ; PRISCILA SCHMIDT LORA; MARIANA ROST MEIRELES

Introdução: A aplicação de nanopartículas de ouro (AuNPs) funcionalizadas na construção de biossensores contribui para a fixação e orientação dos anticorpos de forma que seu fragmento de ligação ao antígeno esteja livre para interação. Diferentes compostos, contendo grupos tiolados vêm sendo utilizados para a funcionalização das AuNPs, destacando-se o Polietilenoglicol Tiolato Amina (HS-PEG-NH₂) e o 3-(mercaptopropil)trimetoxissilano (MPTS). O estudo sobre a formação dos complexos envolvendo AuNPs funcionalizadas e anticorpos requer elevados recursos temporais e financeiros. Assim, o uso de novas ferramentas de biologia computacional/bioinformática pode direcionar os esforços e colaborar com o entendimento destes complexos. **Objetivo:** Este trabalho visou identificar o melhor agente funcionalizante de AuNPs através de simulação por bioinformática estrutural da interação entre AuNP-funcionalizada-antígeno e anticorpo. **Materiais e Métodos:** A primeira etapa da metodologia foi a obtenção das estruturas tridimensionais a partir do *blastP* seguido de avaliação e modelagem do anticorpo, desenho tridimensional das estruturas químicas e minimização de Energia no *software* Avogadro. A segunda etapa envolveu a utilização destas estruturas em abordagem de *docking* molecular no *software* HDOCK. Os acoplamentos foram avaliados conforme o resultado de *docking score*. Foi necessário restringir a análise do anticorpo para o seu domínio *FAB* e modelar separadamente a cadeia leve e a cadeia pesada, devido à limitação dos *softwares* utilizados. **Resultados:** Os resultados revelaram que o *docking score* para a interação entre AuNP-[HS-PEG-NH₂]-antígeno e a cadeia pesada do anticorpo é de -217,3. Para a mesma interação, porém com a cadeia leve, o valor é de -217,00. No caso da interação entre AuNP-MPTS-antígeno com a cadeia pesada do anticorpo, o valor é de -215,64. Para essa mesma interação com a cadeia leve do anticorpo é de -210,15. Um menor valor de *docking score* indica uma ligação mais forte entre as interações de moléculas. Essa maior afinidade é evidenciada no complexo com HS-PEG-NH₂, o qual apresenta um *docking score* inferior ao do MPTS. **Conclusão:** Conclui-se que a AuNP funcionalizada com HS-PEG-NH₂ demonstrou uma interação de *docking molecular* maior, embora ambas tenham resultados de ancoramento que sugerem interação *in vitro* para sua aplicação em biossensores.

Palavras-chave: 3-(mercaptopropil)trimetoxissilano, Antígeno, Biologia computacional, Docking molecular, Polietilenoglicol tiolato amina.