



ANÁLISE BIOQUÍMICA IN SILICO DA INTERAÇÃO DA INDOMETACINA COM A CICLO-OXIGENASE-2 E PUBLICAÇÃO DE UM LIVRO DIGITAL

AMANDA CRISTINA MOÇO; MARLON MARCIO FERREIRA URATA; RENATO MASSAHARU HASSUNUMA; PATRÍCIA CARVALHO GARCIA; SANDRA HELOISA NUNES MESSIAS

INTRODUÇÃO: Os anti-inflamatórios esteroidais (AINEs) tem por função reduzir a síntese das prostaglandinas (PGs) pela inibição das enzimas ciclo-oxigenases-1 e 2 (COX-1 e COX-2). O mecanismo de ação dos AINEs, incluindo a indometacina (IMN), consiste em inibir a COX-2 com o intuito de diminuir a produção de PGs, atuando, desta forma no combate à inflamação, dor e febre. **OBJETIVOS:** Analisar a estrutura bioquímica do anti-inflamatório IMN e sua interação com a enzima COX-2, por meio de *scripts* desenvolvidos para o *software* RasMol, onde serão produzidas imagens tridimensionais das proteínas estudadas. **METODOLOGIA:** Inicialmente, foi realizado um levantamento bibliográfico e de arquivos PDB referentes IMN e a COX-2. A partir dos levantamentos realizados, foram desenvolvidos *scripts* de comandos para o *software* RasMol, no intuito de analisar a estrutura da IMN e da interação entre a IMN e COX-2. Os resultados obtidos na presente pesquisa foram usados na produção de um livro digital sobre o assunto, desenvolvido no *software* Microsoft PowerPoint 2021®. **RESULTADOS:** Foram desenvolvidos *scripts* para o programa RasMol, utilizando o arquivo PDB 4COX4, a partir dos quais foram obtidas imagens onde é possível observar que: a) o átomo de cloro do grupo 4-clorobenzoil da IMN se liga ao resíduo de leucina 384 da COX-2; b) o grupo benzeno do grupo 4-clorobenzoil da IMN é estabilizado por meio de interações hidrofóbicas com a fenilalanina 381, leucina 384, tirosina 385 e triptofano 387 da COX-2; c) o átomo de oxigênio do grupo 4-clorobenzoil da IMN liga-se às cadeias laterais da valina 349 e serina 530 da COX-2; d) o grupo indol do grupo metilindol da IMN liga-se a valinas 349 e 523, leucina 352, serina 353, tirosina 355 e alanina 527 da COX-2; e) o grupo carboxila do grupo ácido etanoico realiza uma ponte salina com o resíduo de arginina 120 da COX-2. Estes resultados foram publicados no livro intitulado “Indometacina: Uma visão bioquímica”. **CONCLUSÃO:** Os resultados obtidos nesta pesquisa poderão ser importantes para o desenvolvimento de futuros fármacos sintéticos não seletivos para a COX-2, que poderão apresentar melhor eficiência anti-inflamatória e menos efeitos colaterais.

Palavras-chave: Bioquímica, Bioinformática, Indometacina, Ciclo-oxigenase-2, Anti-inflamatórios.