



MODELAGEM MOLECULAR QUÂNTICA DA INTERAÇÃO TESTOSTERONA-RECEPTOR: ESTUDO IN SILICO PELO MÉTODO MFCC.

Paulo Henrique Lima Barbosa¹, Nilton Ferreira Frazão²

RESUMO

A testosterona (T) é classificada como hormônio da família dos esteroides anabolizantes. Entre outras funções a T atua no aumento da densidade mineral óssea, aumento da massa muscular e aumento da força, efeitos classificados como anabólicos. A T sofre ação da enzima 5 α -redutase que é transformada em Dihidrotestosterona (DHT), esse novo hormônio é o maior responsável pelos efeitos androgênicos. A força de interação da T com a SHBG é 2 % está de forma livre, não ligada, isso constitui a representação da T total no organismo. Assim neste estudo, investigaram-se as interações testosterona e enzima 5 α -redutase. Foram utilizados cálculos clássicos para explorar as configurações moleculares dos aminoácidos apolares, que nos dar a melhor geometria, através do campo de força universal. Os cálculos de otimização quântica foram feitas usando dois diferentes funcionais (LDA e GGA) da teoria do funcional da densidade (DFT). Estimou-se as energias de ligação entre fármacos e enzima para nortear o drug delivery utilizando técnicas de bioquímica computacional, como o Fracionamento Molecular com Capuzes Conjugados (MFCC), dentro da teoria do funcional da densidade (DFT).

Palavras-chave: Testosterona, DFT, MFCC.

¹ Aluno da Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Física e matemática, UFCG, Cuité, PB, e-mail: paulo.henrique@estudante.ufcg.edu.br

² Doutor, Professor do Magistério Superior, Unidade Acadêmica de Física e matemática UFCG Cuité, PB, e-mail: nilton.ferreira@professor.ufcg.edu.br



QUANTUM MOLECULAR MODELING OF THE TESTOSTERONE-RECEPTOR INTERACTION: IN SILICO STUDY BY THE MFCC METHOD.

ABSTRACT

Testosterone (T) is classified as a hormone in the family of anabolic steroids. Among other functions, T acts to increase bone mineral density, increase muscle mass and increase strength, effects classified as anabolic. T undergoes the action of the enzyme 5 α -reductase which is transformed into Dihydrotestosterone (DHT), this new hormone is the main responsible for the androgenic effects. The interaction strength of T with SHBG is 2% is free, not linked, this is the representation of total T in the organism. Thus, in this study, the interactions between testosterone and 5 α -reductase enzyme were investigated. Classical calculations were used to explore the molecular configurations of nonpolar amino acids, which give us the best geometry, through the universal force field. Quantum optimization calculations were made using two different functionalities (LDA and GGA) from the density functional theory (DFT). The linkage between drugs and enzyme was estimated to guide drug delivery using computational biochemistry techniques, such as Molecular Fractionation with Conjugated Hoods (MFCC), within the density functional theory (DFT).

Keywords: Testosterone, DFT, MFCC.