



MODELAGEM MOLECULAR QUÂNTICA DA INTERAÇÃO DE FÁRMACO COM A ALPHA-SINUCLEÍNA: ANÁLISE ENERGÉTICA IN SILICO PELO MÉTODO MFCC.

Rafael de Lima Medeiros¹, Nilton Ferreira Frazão²

RESUMO

Sabemos que desordens neurodegenerativas, como o mal de Parkinson e Alzheimer, são doenças sem cura até o momento. Entretanto, González-Lizárraga (2017) publicou um artigo na renomada revista Scientific Report apresentando um modelo que promete trazer um grande avanço no tratamento do Mal de Parkinson. Esse grupo de pesquisadores mostraram por meio de testes com animais, que a droga doxíciclina retarda a formação dos oligômeros de sinucleína, responsáveis pela cobertura superficial e lesão dos neurônios presentes no tronco cerebral, impedindo o transporte de dopamina, em outras palavras, a doxíciclina age como um fator anti-oxidante impedindo a formação de placas oligoméricas. Ciente da relevância dessa descoberta, é de extrema importância analisarmos teoricamente o processo de interação doxíciclina@alfa-sinucleína por meio de métodos de modelagem molecular computacional, a fim de quantificar o grau energético de interação desse complexo. Assim, foi realizado o *docking molecular* e o método de fracionamento molecular com capuzes conjugados, considerando estruturas moleculares extraídas de bancos de dados certificados (DrugBank e Protein Data Bank). Assim, realizou-se os cálculos quânticos, onde foi possível proceder uma análise quantitativa, por meio de cálculos quânticos. Os resultados expõem que existe uma forte interação entre a Doxíciclina e a alfa-Sinucleína. Os resultados adquiridos sugerem que é possível desenvolver um mecanismo de entrega inteligente de droga, resultando assim, em um grande avanço no tratamento da doença de Parkinson.

Palavras-chave: Doença Neurodegenerativa, Fracionamento Molecular, Doxíciclina

¹Aluno da Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Cuité, PB, e-mail: rafaelfufcg@gmail.com

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



Quantum molecular modeling of drug interaction with alpha-synuclein: In silico energy analysis by the MFCC method.

ABSTRACT

We know that neurodegenerative disorders, such as Parkinson's and Alzheimer's are unhealed diseases so far. However, González-Lizárraga (2017) published an article in the renowned Scientific Report journal presenting a model that promises to bring a breakthrough in the treatment of Parkinson's disease. This group of researchers showed through animal testing that the drug doxycycline slows the formation of alpha-synuclein oligomers, which are responsible for the superficial covering and damage of neurons present in the brain stem, preventing the transport of dopamine, in other words, doxycycline acts as an anti-oxidant factor preventing the formation of oligomeric plaques. Aware of the relevance of this finding, it is extremely important to theoretically analyze the process of doxycycline@alpha-synuclein interaction employing computational molecular modeling methods to quantify the energy degree of interaction of this complex. Thus, molecular docking and the molecular fractionation method with conjugated caps were performed, considering molecular structures extracted from certified databases (DrugBank and Protein Data Bank). Therefore, quantum calculations were carried out, where it was possible to implement a quantitative analysis by chemical calculations. The results show that there is a strong interaction between doxycycline and alpha-synuclein. The results obtained suggest that it is possible to develop an intelligent drug delivery mechanism, thus resulting in a breakthrough in the treatment of Parkinson's disease.

Keywords: Neurodegenerative Disease, Molecular Fractionation, Doxycycline.