

ESTUDO COMPUTACIONAL DA INIBIÇÃO DA ANIDRASE CARBÔNICA II PELA ACETAZOLAMIDA, UTILIZANDO O SOFTWARE RASMOL PARA ANÁLISE BIOQUÍMICA E ESTRUTURAL (APOIO UNIP)

Aluna: Heloísa de Carvalho Sampaio

Orientador: Prof. Dr. Renato Massaharu Hassunuma

Curso: Farmácia

Campus: Bauru

A anidrase carbônica é uma enzima que desempenha a função de regulação do pH e balanço de fluidos nas diversas partes do corpo humano. A acetazolamida é um dos inibidores da anidrase carbônica e sua ação é eficaz no controle da secreção de fluidos, podendo ser utilizada no tratamento de alguns tipos de glaucoma e da epilepsia. A atual pesquisa teve como objetivo principal realizar um estudo bioquímico estrutural da anidrase carbônica II inibida pela acetazolamida, a partir do levantamento de arquivos do tipo PDB e sua aplicação no *software* RasMol 2.7.4.2. A partir da análise do arquivo PDB 3HS4, foram obtidos: código; nome; origem e classificação da estrutura registrada no site *Protein Data Bank*; número de cadeias; grupos; átomos; ligações químicas; hélices alfa e de curvas presentes na estrutura; sequência dos aminoácidos que compõem a estrutura; posição de elementos da estrutura secundária e coordenadas da posição nos eixos x, y e z dos átomos que compõem a estrutura. A partir das descrições apresentadas no artigo que gerou o arquivo PDB 3HS4, foram criados *scripts* no *software* RasMol 2.7.4.2 para obtenção de imagens que ilustram o sítio de ligação entre a acetazolamida e a anidrase carbônica II. Os resultados obtidos neste projeto de pesquisa fornecem dados bioquímicos estruturais relacionados à anidrase carbônica II inibida pela acetazolamida, que poderão ser utilizados em futuras pesquisas relacionadas à compreensão da ação da acetazolamida sobre a anidrase carbônica II e sua ação como agente terapêutico de algumas doenças.