

INIBIÇÃO DA ENZIMA ACETILCOLINESTERASE POR DIFERENTES FÁRMACOS UTILIZADOS NA TERAPÊUTICA DO MAL DE ALZHEIMER: ANÁLISE BIOQUÍMICA E ESTRUTURAL UTILIZANDO O SOFTWARE RASMOL (APOIO UNIP)

Aluna: Letícia Graziela Costa Santos

Orientador: Prof. Dr. Renato Massaharu Hassunuma

Curso: Biomedicina

Campus: Bauru

A acetilcolinesterase é uma serina hidrolase responsável pela regulação da neurotransmissão colinérgica. Segundo a Hipótese Colinérgica, a disfunção da sua atividade enzimática é uma das principais características da Doença de Alzheimer, sendo responsável pela perda de funções cognitivas como a memória. Assim, com o objetivo de estudar os sítios de ligação entre a acetilcolinesterase e seus inibidores, foram analisadas as áreas de interação molecular com os fármacos tacrina, donepezil, galantamina, huperzina A e rivastigmina, por meio de *scripts* desenvolvidos para o *software* RasMol 2.7.4.2. A partir do levantamento de arquivos depositados no *site Protein Data Bank* (PDB), foram escolhidos os arquivos PDB 2ACE (referente à acetilcolinesterase), 1ACJ (referente à tacrina), 1EVE (referente ao donepezil), 1DX6 (referente à galantamina), 1VOT (referente à huperzina A) e 1GQR (referente à rivastigmina). A análise dos arquivos PDB forneceu dados acerca da estrutura dos complexos, como os principais resíduos de aminoácidos e átomos dos inibidores que participam da ligação com a acetilcolinesterase. Desta forma, os resultados obtidos nesta pesquisa fornecem dados importantes sobre a interação dos anticolinesterásicos com a acetilcolinesterase, que podem ser importantes em futuras pesquisas para o desenvolvimento de novas drogas para o tratamento do mal de Alzheimer.