

# VISUALIZAÇÃO TRIDIMENSIONAL DA LIGAÇÃO DO ANTI-INFLAMATÓRIO NÃO ESTEROIDAL IBUPROFENO COM A CICLOOXIGENASE E A ALBUMINA SÉRICA UTILIZANDO O SOFTWARE RASMOL (APOIO DA UNIP)

**Aluna:** Milena da Silva Vicente

**Orientador:** Prof. Dr. Renato Massaharu Hassunuma

**Curso:** Farmácia

**Campus:** Bauru

Os anti-inflamatórios não esteroidais (AINEs) estão entre os medicamentos mais usados atualmente no Brasil, sendo um deles o ibuprofeno (IBP). Esse fármaco é capaz de se ligar à albumina sérica humana (ASH), que o transporta até a ciclo-oxigenase-2 (COX-2), uma enzima essencial no processo inflamatório. O IBP, ao se ligar à COX-2, promove a sua inibição e, conseqüentemente, seu efeito anti-inflamatório. Com o objetivo de estudar as ligações do IBP ao sítio ativo da COX-2 e da ASH, foram desenvolvidos *scripts* para visualização no *software* de simulação computacional RasMol 2.7.5.2. Para a visualização da estrutura da COX-2 ligada ao IBP foi utilizado o arquivo 4PH9.pdb. Foi observado que na ligação do IBP com a COX-2 ocorrem interações hidrofílicas entre ARG120 e TYR 355 da COX-2, localizadas no canal de entrada da enzima. Para a visualização da estrutura da ASH ligada ao IBP foi utilizado o arquivo 2BXG.pdb. Foi observado que a ASH possui dois sítios de ligação para o IBP, sendo o FA3,4 o sítio principal localizado no subdomínio III e o sítio FA6, o sítio secundário localizado entre a transição do subdomínio IIA e IIB. Tendo em vista o crescente aumento do consumo dos AINEs, em especial do IBP, os resultados bioquímicos e estruturais obtidos neste projeto poderão ser úteis para compreender o mecanismo de ação do fármaco, bem como para desenvolver novos AINEs.