

## ESTUDOS DE MODELAGEM COMPARATIVA DO RECEPTOR ESTROGÊNICO HUMANO DO TIPO $\beta$ E ESTUDOS DE DOCKING ENTRE COMPOSTOS ORGANOCLORADOS DA CLASSE DOS CICLODIENOS E CLORDANOS COM O RECEPTOR ESTROGÊNICO HUMANO $\alpha$ E $\beta$

Carine Sampaio Santana<sup>1</sup>; Elisângela Santos<sup>1</sup>; Franco Henrique Andrade Leite<sup>2</sup>  
André Lacerda Braga Teles<sup>2</sup>

Dentre os vários produtos químicos com atividade estrogênica destacam-se: hormônios presentes em cosméticos, anabolizantes utilizados em rações animais, fitoestrógenos e poluentes orgânicos persistentes (POPs). De modo genérico, POPs são compostos lipofílicos, resistentes à degradação, persistentes no ambiente, com capacidade de bioacumulação em pessoas e animais e representam uma importante fonte de contaminação ambiental, com toxicidade relevante à saúde humana. Devido a sua estabilidade, acabam se perpetuando na cadeia alimentar, sendo transportados a grandes distâncias a partir do seu sítio original, fazendo com que os indivíduos sejam expostos aos resíduos que contaminam a água e alimentos. Além do efeito hormonal, suas principais ações deletérias são carcinogênese e distúrbios nos sistemas nervoso e imune. A estrutura tridimensional do receptor estrogênico do tipo  $\beta$  ainda não foi determinada, sendo o objetivo deste estudo a construção do modelo deste receptor por modelagem comparativa. Posterior a construção do modelo, 7 compostos da classe dos clordanos e ciclodienos serão avaliados por metodologia de docking, os compostos serão desenhados utilizando o software Gaussview 5.0 e refinados por métodos de mecânica molecular seguido por métodos quânticos. A metodologia de docking será aplicada utilizando o software AutoDock Vina 1.0.2. Os cálculos de interação serão realizados entre os compostos e os receptores estrogênicos do tipo  $\alpha$  e  $\beta$  no intuito de estabelecer uma possível relação de afinidade entre estes através dos seus valores de energia de ligação. Estes dados irão fornecer informações acerca da toxicidade destes compostos, com relação a sua atividade estrogênica, ratificando, ou não, a hipótese da modulação destes receptores como mecanismo de ação. Os resultados deste trabalho irão orientar ensaios experimentais, de forma que sejam realizados testes posteriores com compostos que apresentem alta afinidade in silico aos receptores estrogênicos.

**Palavras-chave:** Docking; organoclorados; receptor estrogênico.

<sup>1</sup>Estudantes do Curso de Farmácia da Faculdade Maria Milza - FAMAM

<sup>2</sup>Docentes do Curso de Farmácia da Faculdade Maria Milza – FAMAM