

COCRISTALIZAÇÃO DE MOLÉCULAS ATIVAS, ENSAIOS COM ANTIPSICÓTICOS E AGROTÓXICOS

XXXVIII Encontro de Iniciação Científica

Francisca Manuela Santos da Silva, Ito Liberato B Neto, Eduardo Henrique Salviano Bezerra, Jackson Lima Amaral, Valder Nogueira Freire

A cristalização é a técnica mais utilizada e melhor consolidada para resolução tridimensional de estruturas proteicas e de pequenas moléculas. Um cocrystal é uma espécie cristalina constituída por dois ou mais componentes puros que em condições ambientais, se encontram no estado sólido. Sua obtenção é passo primordial para obtenção da estrutura pelo método de difração de raios X. Entre importantes proteínas alvos de estudos biofísicos temos a lisozima e a HSA, contudo pouco se sabe de seus complexos com agrotóxicos e antipsicóticos. Que seriam as grandes motivações desse estudo. Além disso, cocrystalis farmacêuticos representam uma oportunidade para a criação de patentes de novas formulações de fármacos já existentes, motivando nesse estudo a investigação de complexo de antipsicóticos. As lisozimas, também conhecidas como muramidase, são enzimas (EC 3.2.1.17) que causam danos às paredes celulares das bactérias por catalisar a hidrólise de ligações beta-1,4 entre os resíduos de ácido n-acetilmurâmico e a N-acetil-D-glucosamina em peptidoglicanos e entre resíduos de N-acetil-D-glicosamina em quitodextrinas. Esta enzima é um modelo de estudos estruturais, dito isto alguns aspectos relevantes dela são a sua fácil obtenção, rápida cristalização e capacidade de interagir com inúmeros compostos. Dentre eles, temos a descrição desta com o imidaclopride, mas não existem dados estruturais que demonstrem a interação desta enzima com agrotóxicos, que são largamente usados na agricultura e são passíveis de serem encontrados em animais que se alimentem de vegetais contaminados. Deste modo realizou-se ensaios de cristalização da lisozima a 50mg/mL complexada com os agrotóxicos, utilizando-se a técnica de difusão de vapor em gota suspensa com uma condição de cristalização, dados de difração de cristais foram coletados no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, Campinas, São Paulo (LNLS). Paralelamente, foram realizados ensaios de cristalização com outro agrotóxico, o ácido bórico.

Palavras-chave: Cristalização. Lisozima. Albumina Serica Humana. Agrotóxicos.