

# MODELAGEM MOLECULAR, DOCKING E SIMULAÇÕES DINÂMICAS DE LECTINA DE SEMENTE DE *DIOCLEA LASIOPHYLLA*: UMA PROTEÍNA EDEMATOGÊNICA E HIPERNOCICEPTIVA

XXXVIII Encontro de Iniciação Científica

Sarah Elizabeth Gomes Correia, Paula Ingrid Maia Machado, Ana Paula Moreira de Sousa Vital, Cláudia Figueirêdo Lóssio, Kyria Santiago do Nascimento, Benildo Sousa Cavada

As lectinas são proteínas, ou glicoproteínas, que fazem parte de uma classe de proteínas que se ligam reversivelmente a carboidratos ou glicoproteínas com diversas especificidades e funções, como propriedades inseticidas até anti-tumorais, desde a primeira lectina descoberta em 1888 por Stillmark, a ricina. A subtribo Diocleinae possui lectinas com bastante similaridade nas estruturas e diferentes efeitos observados em ensaios de atividade biológica, o que demonstra pequenas diferenças estruturais, por isso a determinação e caracterização das estruturas tridimensionais dessas proteínas são tão importantes. Estudos recentes apontam o potencial anticancerígeno de lectinas da família Leguminosae, avaliando seu efeito antiproliferativo e sua capacidade de induzir morte celular por glioma via apoptose e autofagia. Portanto, a *Dioclea lasiophylla* (DlyL) foi purificada por cromatografia de afinidade em matriz Sephadex®G-50 e estrutura de primária foi determinada através de uma combinação de espectrometria de massa em e sequenciamento de DNA, em estudos anteriores. Aqui, a estrutura tridimensional teórica foi predita por modelagem de homologia e a proteína foi submetida a ligantes de triagem por docking molecular. A estabilidade de ligação da lectina com D-manosídeo de metila-metil foram avaliadas por dinâmica molecular. DlyL mostrou alta similaridade com outras espécies do mesmo gênero.

Palavras-chave: Lectina. *Dioclea lasiophylla*. Docking. Modelagem.