

ANÁLISE ESTRUTURAL DA INTERAÇÃO DA LECTINA RECOMBINANTE DE CYMBOSEMA ROSEUM EM COMPLEXO COM AGENTES ANTINEOPLÁSICOS

Leonardo Andrade Abreu de Amorim, Mateus Fernandes Farias, Bruno Anderson Matias da Rocha

A cisplatina e o metotrexato são ambos agentes antitumorais que possuem uma potente ação antineoplásica. Contudo, tais agentes apresentam utilização clínica limitada pela inerente nefrotoxicidade. Lectinas são proteínas ligantes a carboidrato, o que lhes concede importância na interação celular e o desencadeamento de reações biológicas. A lectina manose-específica de *Cymbosema roseum* (CRLI) já demonstrou potencial anti-inflamatório em trabalhos anteriores permitindo correlacioná-la com um possível potencial nefroprotetor em lesões causadas por antineoplásicos. Sendo assim, o objetivo inicial do projeto foi produzir a proteína CRLI de maneira recombinante e testar sua possível interação com os agentes antineoplásicos cisplatina e metotrexato, causadores da nefrotoxicidade, a partir de simulações computacionais usando docking molecular. Para atender os objetivos, a estrutura da lectina foi obtida a partir do Protein Data Bank. O software AUTODOCK TOOLS foi empregado no preparo das moléculas para o ensaio de docking molecular. As sequências dos antineoplásicos foram obtidas a partir do banco de dados PUBCHEM. No caso da cisplatina, o íon de platina foi substituído por níquel, devido limitações no software. Os ensaios de docking foram feitos usando o software Autodock Vina e docking foi direcionado à região correspondente ao sítio ativo da lectina. Os resultados obtidos mostram parâmetros de afinidade elevados no caso da cisplatina, bem como rmsd com valores bastante discrepantes, com uma média acima de 26,50. Para o docking com o metotrexato, foram obtidos valores bastante discrepantes de rmsd, com uma média de valores de 5,00. Os valores obtidos indicam que os antineoplásicos não interajam de fato com a lectina, o que pode ser positivo para uma futura prospecção da lectina como um possível fármaco anti-inflamatório renal.

Palavras-chave: Docking. *Cymbosema*. Cisplatina. Metotrexato.