

## **EFEITOS DOS MÉTODOS DE CÁLCULO DE CARGAS PARCIAIS NA DOCAGEM MOLECULAR**

FRANCISCO GILDIVAN FERNANDES DOS SANTOS,

A utilização de métodos computacionais nas pesquisas científicas é de grande importância, uma vez que o grande volume de dados gerados nos diversos estudos demandam soluções de processamento cada vez mais complexas. A busca por novos fármacos não é diferente, e envolve várias etapas de isolamento, caracterização e verificação de atividade de uma variedade de substâncias, inclusive fazendo uso de animais como cobaias. No caso dos anti-inflamatórios, pode-se utilizar técnicas de docagem molecular para avaliar o potencial de ligação da droga com a enzima ciclooxigenase-2 (COX-2), reduzindo a lista das substâncias que participarão dos ensaios com animais. Neste tipo de simulação, os átomos do ligante e receptor tem suas cargas parciais calculadas segundo o método de Gasteiger, e então um mapeamento da região de contato é realizado com base nestas, considerando-se ainda diversas possibilidades de orientação do ligante no sítio do receptor. Neste projeto serão avaliadas as diferenças nas simulações quando as cargas parciais são calculadas por métodos de química quântica, especificamente o método de Lowdin e Mulliken.

**PALAVRAS-CHAVE:** DOCAGEM MOLECULAR

**ÁREA TEMÁTICA:** CIÊNCIAS BIOLÓGICAS (PESQUISA)

**FORMA DE APRESENTAÇÃO:** RELATO DE EXPERIÊNCIA