



ISBN: 978-65-89908-41-8

II InovaBiotec

CONGRESSO DE INOVAÇÃO
E BIOTECNOLOGIA

14 a 16 de julho de 2021



MODELAGEM DA PROTEÍNA EGFR DE CANIS LUPUS FAMILIARIS VISANDO NOVOS FÁRMACOS PARA O TRATAMENTO DO TUMOR DE MAMA EM CADELAS

II InovaBiotec - Congresso de Inovação e Biotecnologia, 2ª edição, de 14/07/2021 a 17/07/2021
ISBN dos Anais: 978-65-89908-41-8

GÖTZE; Marcelo Mendes ¹, PASINI; Manoela ², FILHO; Ivan Bustamante Cunha Filho ³

RESUMO

Os tumores de mama correspondem ao tipo de neoplasia mais frequente em cadelas. Os fármacos mais empregados são: doxorrubicina, carboplatina e vincristina. Estes são inespecíficos, não distinguindo diferenças bioquímicas significativas entre células neoplásicas e saudáveis. A bioinformática possibilita o estudo de um grande conjunto de dados em um curto período de tempo. Com o docking, moléculas bioativas são testadas para um determinado alvo a fim de estabelecer qual delas apresenta melhor acomodação ao sítio ativo. A proteína EGFR da família dos receptores de tirosina kinase, identificada como super expressa em câncer de mama em cadelas, representa um atrativo alvo terapêutico, podendo o planejamento de candidatos a fármacos dirigidos a essa proteína enriquecer o arsenal terapêutico contra a doença. Este trabalho tem como objetivo a seleção e otimização de ligantes da proteína EGFR como processo integrante do planejamento de novos candidatos a fármacos antitumorais em cadelas. Para a modelagem molecular comparativa, a sequência de aminoácidos da proteína alvo de *Canis l. familiaris* foi obtida no UniProtKB (F1PF03). Sua estrutura terciária foi predita utilizando os servidores Phyre2, SwissModel e I-TASSER, sendo refinadas utilizando o servidor 3Drefine. A qualidade dos modelos preditos foi avaliada utilizando os servidores SwissProt Structure Assessment, Verify3D, ProSA-web, VoromQA e TM-align. Na modelagem estrutural da EGFR os melhores resultados foram obtidos com o servidor Phyre2, tendo sido utilizado para as análises subsequentes por apresentar os melhores valores no gráfico de Ramachandran (92,73% dos resíduos em regiões favoráveis), MolProbity score (2,76) e Verify3D (93,79% dos resíduos com escore >0,2), TM-align score (0,99871), Errat2 (91.489), ProsaWeb (-7,59) e VoromQA (0,491). A etapa que está em andamento é a identificação dos sítios de ligação através do 3D Ligand e Coach e de ligantes para posterior docking dos inibidores.

¹ PPGBiotec Univates, marcelo.gotze@universo.univates.br

² PPGBiotec Univates, manoela.pasini@universo.univates.br

³ PPGBiotec Univates, ivanbustamante@universo.univates.br

PALAVRAS-CHAVE: Bioinformática, Docking, EGFR, Proteômica, Tumor de Mama em Cadelas