

ESTUDOS DE QSAR 3D PARA UM CONJUNTO DE INIBidores DE BUTIRILCOLINESTERASE HUMANA

Humberto F. Freitas, Odailson S. Paz e Marcelo S. Castilho*

Departamento de Medicamentos, Faculdade de Farmácia, Universidade Federal da Bahia, Campus Universitário de Ondina, 40170-115 Salvador - BA, Brasil

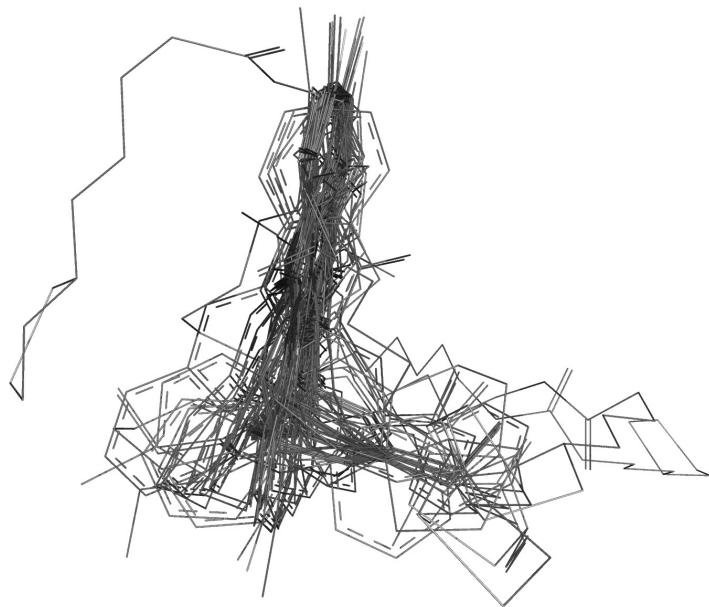


Figura 1S. Padrão de interação dos inibidores de BuChE para CONF-COMBO. Resíduos importantes para o mecanismo catalítico da enzima estão representados na Figura 2

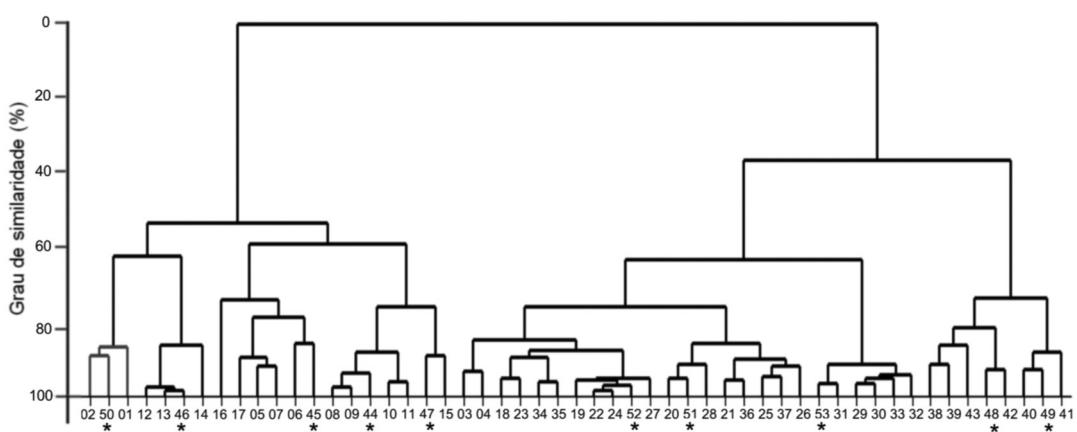


Figura 2S. Análise hierárquica de agrupamentos para inibidores de BuChE na CONF-GOLD. Inibidores que fazem parte do conjunto teste estão marcados com asterisco (*)

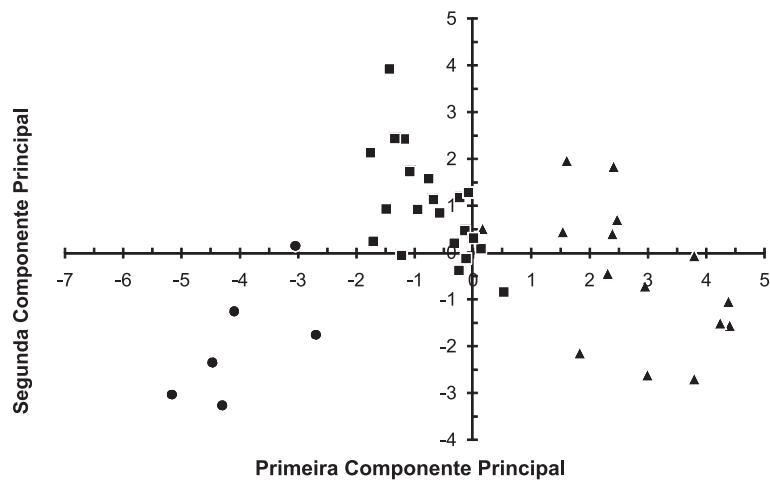


Figura 3S. Análise de componentes principais de inibidores (grupo treino) de BuChE humana para CONF-COMBO

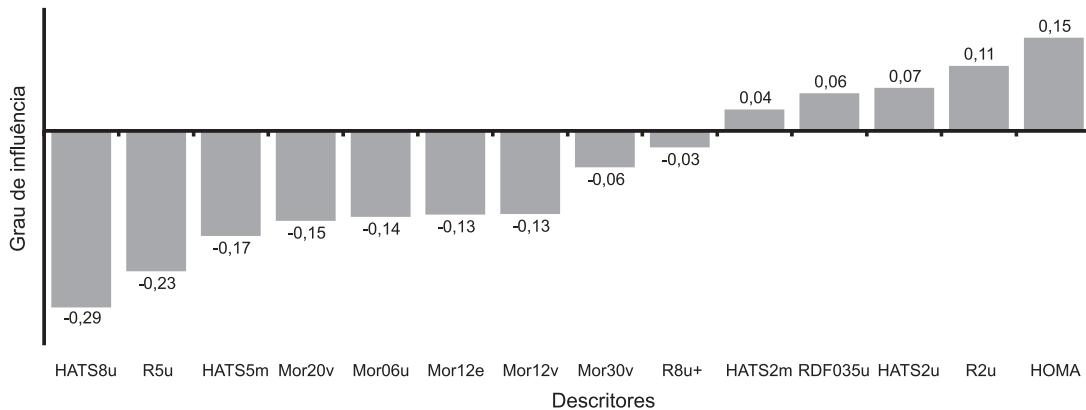


Figura 4S. Gráfico do vetor de regressão do melhor modelo de QSAR para CONF-COMBO

Tabela 1S. Grau de correlação entre os descritores dos modelos CONF-GOLD e CONF-COMBO

	Descritores do modelo CONF-GOLD									
	RDF055u	Mor12u	Mor24u	Mor20m	Mor14v	Mor15v	H7u	HATS5u	HATS8u	R5u
HOMA	0.068	0.178	0.117	0.329	0.335	0.331	0.002	0.106	0.226	0.036
RDF035u	0.150	0.239	0.241	0.470	0.532	0.562	0.003	0.118	0.012	0.283
Mor06u	0.067	0.003	0.001	0.040	0.009	0.005	0.056	0.024	0.027	0.032
Mor12v	0.533	0.838	0.235	0.673	0.835	0.710	0.478	0.495	0.188	0.005
Mor20v	0.308	0.484	0.217	0.914	0.764	0.829	0.107	0.177	0.195	0.138
Mor30v	0.482	0.567	0.089	0.350	0.495	0.343	0.519	0.357	0.197	0.017
Mor12e	0.525	0.907	0.180	0.447	0.651	0.498	0.554	0.604	0.138	0.018
HATS2u	0.610	0.711	0.040	0.232	0.526	0.323	0.492	0.598	0.049	0.001
HATS8u	0.189	0.291	0.048	0.221	0.288	0.258	0.242	0.115	0.952	0.029
HATS2m	0.136	0.196	0.029	0.048	0.242	0.158	0.076	0.187	0.151	0.002
HATS5m	0.048	0.154	0.088	0.035	0.014	0.009	0.263	0.051	0.047	0.136
R2u	0.431	0.703	0.294	0.743	0.808	0.754	0.169	0.517	0.078	0.063
R5u	0.006	0.056	0.017	0.018	0.000	0.007	0.132	0.256	0.051	0.929
R8u+	0.696	0.665	0.098	0.456	0.638	0.472	0.513	0.362	0.298	0.04
R5m	0.099	0.035	0.001	0.020	0.136	0.079	0.003	0.091	0.011	0.121