

BASES MOLECULARES DA AÇÃO ANTI-INFLAMATÓRIA DOS ÁCIDOS OLEANÓLICO E URSÓLICO SOBRE AS ISOFORMAS DA CICLO-OXIGENASE POR DOCKING E DINÂMICA MOLECULAR

Wendell Santos Magalhães* e Célia Maria Corrêa

Escola de Farmácia, Universidade Federal de Ouro Preto, 35400-000 Ouro Preto – MG, Brasil

Ricardo Bicca de Alencastro

Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21949-900 Rio de Janeiro – RJ, Brasil

Tanus Jorge Nagem

Instituto de Ciências Exatas e Biológicas, Universidade Federal de Ouro Preto, 35400-000 Ouro Preto – MG, Brasil

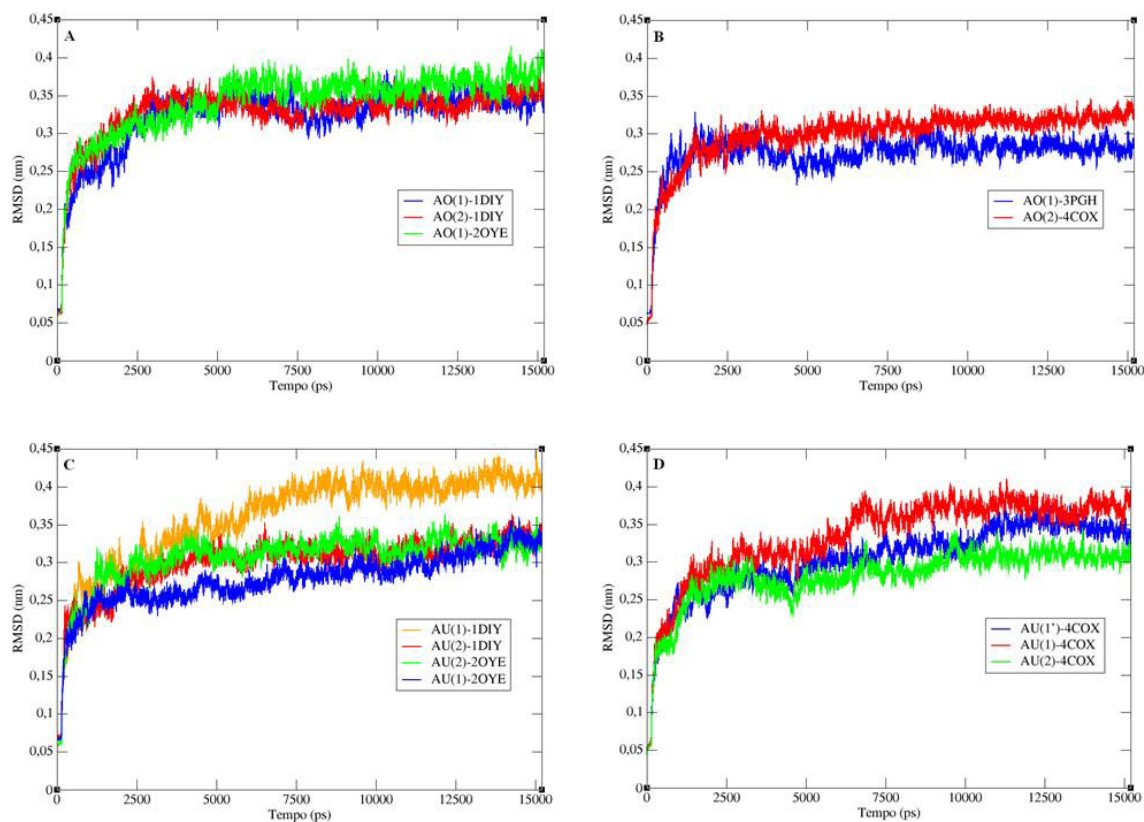


Figura 1S. RMSD de cadeia peptídica dos monômeros de isoformas COX referentes aos complexos de AO com COX-1 (A), AO com COX-2 (B), AU com COX-1 (C) e AU com COX-2 (D)

Tabela 1S. Resultados de dockings das estruturas cristalográficas de isoformas COX com seus respectivos ligantes

Complexo	Nt*	Nc**	RMSD (Å)	ΔG_{bind} (Kcal mol ⁻¹)
1CQE-FLP	2	1	0,79	-7,7
1DIY-ACD	14	9	1,19	-6,1
2OYE-IMR	8	3	1,48	-9,6
2OYU-IMS	8	4	1,86	-7,0
3KK6-CEL	3	1	0,77	-9,9
1CX2-S58	3	1	0,92	-10,0
1PXX-DIF	4	2	1,00	-7,6
3PGH-FLP	2	1	0,52	-8,3
4COX-IMN	4	2	1,72	-10,0

* Número de ligações torcionáveis do ligante cristalográfico. ** Número de clusters em que se agruparam as 20 conformações propostas pelo algoritmo.