

## Simulações de Moléculas com Potencialidades Farmacológicas em Membranas: Esqualamina-POPE/POPG

O estudo das interações entre fármaco e membrana é de grande importância na elaboração de medicamentos e na explicação do mecanismo de ação destes. A Esqualamina é um aminoesteróide promissor para o desenvolvimento de novas drogas, como antibióticos, agente para o tratamento de vários tipos de câncer e degeneração macular da retina. Neste trabalho investiga-se em nível molecular, a interação da Esqualamina com um modelo para uma membrana celular, utilizando a simulação computacional por dinâmica molecular (DM).

Para compor o sistema para a DM, partiu-se de uma membrana hidratada composta por POPE (Palmitoil-Oleil-Fosfatidil-Etanolamina) e POPG (Palmitoil-Oleil-Fosfatidil-Glicerol), na proporção 3:1, baseada na composição fosfolipídica da membrana da bactéria *E. Coli*. Foram inseridas duas moléculas de Esqualamina na fase aquosa e duas moléculas de Esqualamina na bicamada fosfolipídica POPE/POPG. As simulações foram estendidas por dezenas de nanosegundos. Calculou-se o perfil de densidade do sistema e várias funções de distribuição radial (RDF). Pelo perfil de densidade da membrana verificou-se que as moléculas de Esqualamina se localizam na região polar da membrana. Então existe uma interação entre molécula e membrana, preferencialmente na superfície (região polar). Com a análise das Funções de Distribuição Radial (RDF) foi possível determinar que a Esqualamina possui maior afinidade com POPE (zwitteriônico) do que com POPG (aniônico). Determinou-se também que a molécula participa da rede de ligações de hidrogênio na camada de hidratação da membrana. No entanto, a inserção da Esqualamina não provocou modificações nas propriedades da membrana.