

1) Informações da pesquisadora:

Nome: Priscila Vanessa Zabala Capriles Goliatt

Posição: Professora/Coordenadora do projeto

Departamento: Ciência da Computação

Instituição: Universidade Federal de Juiz de Fora

Endereço completo: Campus Universitário, Rua José Lourenço Kelmer, s/n – São Pedro, Juiz de Fora – Minas Gerais

E-mail: capriles@ice.ufjf.br

2) Título do projeto: Estudo em larga escala de fármacos para o tratamento da Doença de Alzheimer: triagem virtual e validação *in vitro*, *ex vivo* e *in vivo*

3) Palavras chave: Memória de curta e longa duração; triagem virtual de fármacos; docking molecular; modelagem de proteínas; síntese química; Doença de Alzheimer

4) Introdução:

A Doença de Alzheimer é uma doença neurodegenerativa progressiva que compromete funções cognitivas e motoras. Por não possuir cura, existe uma grande urgência destacada por trabalhos como os de *Jeffrey Oummings, et al.*, (2017) e *Jaume Folch, et al.* (2016) para a busca de novas terapias para essa doença, uma vez que os tratamentos farmacológicos atuais visam controlar os sintomas e progressão. Com isso, através de uma abordagem de pesquisa que busca unir experimentos *in vitro*, *ex vivo*, *in vivo* e *in silico*, busca-se suprir tamanha demanda para uma terapia definitiva da Doença de Alzheimer.

5) Objetivos:

- Realizar a busca por novos alvos moleculares para o tratamento da Doença de Alzheimer.
- Modelar a estrutura tridimensional dos alvos moleculares selecionados.
- Realizar uma triagem virtual de fármacos contra os alvos selecionados.
- Propor melhorias estruturais aos melhores compostos identificados.

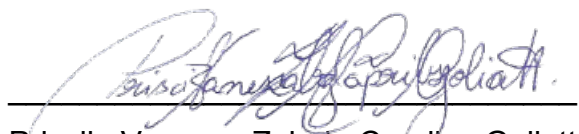
- Sintetizar quimicamente os compostos selecionados, otimizados e desenhados.
- Testar o potencial inibitório, citotóxico e terapêutico dos compostos.
- Avaliar os compostos em camundongos quanto a sua ação em memórias de curta e longa duração e atividade locomotora.

6) Metodologia:

- Construção de uma biblioteca de estruturas 3D de proteínas.
- Construção de uma biblioteca de compostos ligantes.
- Testes de docking e redocking.
- Predições *in silico* de propriedades farmacocinéticas, bioatividade e interações biológicas.
- Síntese química.
- Testes de inibição de atividade enzimática.
- Testes de citotoxicidade.
- Análise de comportamento animal.
- Avaliação estatística.

7) Perspectivas:

Após todos os testes aplicados, espera-se sintetizar um fármaco capaz de atender a demanda de cura da Doença de Alzheimer, que possa ser utilizado de forma segura, eficaz e efetiva.



Priscila Vanessa Zabala Capriles Goliatt