

ESTUDO *IN SILICO* DA INTERAÇÃO MOLECULAR ENTRE A PROTEÍNA MSK2 DE *Medicago sativa* (ALFAFA) E O FLAVONOIDE RUTINA

Ronaldo Silva Duarte¹, Carlos Alonso Leite dos Santos², Bárbara Rayanne Da Silva Teles³, Antônia Adeublena De Araújo Monteiro⁴, Laiane Vieira Da Silva⁵, Yasmim Bento Batista⁶, Antônia Eliene Duarte⁷, Luiz Marivando Barros⁸

A bioinformática, por meio de simulações computacionais (*in silico*), tornou-se fundamental para desvendar as propriedades de proteínas e suas interações com moléculas candidatas a fármacos ou ligantes. Estudos dessa natureza são importantes para o entendimento das propriedades físico-químicas, além do potencial funcional de proteínas, assim como também as suas interações com ligantes específicos. Objetivou-se com este estudo caracterizar a proteína MSK2_MEDSA, avaliando seus parâmetros físico-químicos e estruturais, e investigando sua interação molecular com a rutina, que foi o ligante selecionado para os estudos de ancoragem molecular (docking). A sequência da proteína MSK2_MEDSA (P51138) foi obtida do Uniprot em formato FASTA. Parâmetros físico-químicos foram calculados com o ProtParam, como peso molecular, pI, instabilidade e GRAVY. A estrutura 3D foi gerada pelo SWISS-MODEL em formato PDB. Inibidores e moléculas de água foram removidos no DISCOVERY STUDIO 2021 CLIENT. A qualidade estrutural foi avaliada por QMEANDisCo e a rutina foi o ligante escolhido. O docking foi feito com PyRx (AutoDock VINA), usando grade 62×62×62 Å e análise no Discovery Studio. A qualidade estrutural do modelo 3D da MSK2_MEDSA com escore global de -2,85. Esse valor posicionou o modelo entre 0,5 e 1,0 no escore QMEAN4 normalizado. A composição de aminoácidos (ProtParam) indicou predominância de resíduos hidrofóbicos e polares. Leucina (10,8%), valina (8,6%) e prolina (6,6%) foram os mais abundantes. O docking mostrou afinidade de -10,63 kcal/mol entre rutina e MSK2_MEDSA, revelando interações estáveis com resíduos-chave. ASP A:108 atuou como doador e LYS A:103 como acceptor de ligação por hidrogênio. Outros resíduos como ASN A:113 e ARG A:241 também

¹ Universidade Regional do Cariri, email: ronaldo.duarte@urca.br

² Universidade Federal do Cariri, email: alonso.58231@outlook.com.br

³ Universidade Regional do Cariri, email: barbararayanne.teles@urca.br

⁴ Universidade Regional do Cariri, email: antonia.monteiro7@urca.br

⁵ Universidade Regional do Cariri, email: laiane.vieira@urca.br

⁶ Universidade Regional do Cariri, email: yasmim.batista@urca.br

⁷ Universidade Regional do Cariri, email: antonia.duarte@urca.br

⁸ Universidade Regional do Cariri, email: marivando.barros@urca.br

X SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA
XXVIII SEMANA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA URCA
10 a 14 de NOVENBRO de 2025

Tema: “UNIVERSIDADE E SOCIEDADE NA AGENDA 2030”



contribuíram para a estabilidade do complexo. O estudo *in silico* avaliou a qualidade do modelo estrutural da MSK2_MEDSA, e a forte afinidade de ligação da rutina, de -10,63 kcal/mol, sugere que este flavonoide possui um potencial de interação com a proteína alvo.

Palavras-chave: Bioinformática. Docking Molecular. Afinidade de Ligação.

Agradecimentos:

À Universidade Regional do Cariri (URCA), à Pró-Reitoria de Extensão (PROEX), ao Fundo de Erradicação e Combate à Pobreza (FECOP), ao Laboratório de Biologia e Toxicologia (BIOTOX) e ao Laboratório de Ecofisiologia Vegetal (LECOV).