

## **AVALIAÇÃO DA UTILIDADE DOS SOFTWARES BOVIA DISCOVERY STUDIO E PYMOL PARA VISUALIZAÇÃO E EDIÇÃO DE ESTRUTURAS MOLECULARES *IN SILICO*.**

**Elcio Ferreira Santana<sup>1</sup>**

**Adriano Carlos Soares<sup>2</sup>**

[professoradrianosoares@gmail.com](mailto:professoradrianosoares@gmail.com)

**ÁREA DE CONHECIMENTO:** Ciências da Saúde

**PALAVRAS-CHAVE:** predição; *Boviva Discovery Studio*; *PyMOL*; Bioinformática.

### **INTRODUÇÃO**

A predição e validação de estruturas de compostos por meio computacional é uma forma sofisticada e eficaz. O uso da bioinformática através de *softwares* que realizam cálculos e programação permitem a modelagem de estruturas a partir de computadores ou notebooks (KUMAR *et al.*, 2021). Um dos *softwares* utilizados é o *Boviva Discovery Studio* que permite a partir do carregamento das estruturas fazer modificações estruturais e também observações *in silico* desses compostos. Esse software é de acesso gratuito (NOH; FAZALUL; WAHAB e MOHD, 2021). Um outro software *PyMOL* permite a visualização aprofundada da estrutura, e dos resíduos de aminoácidos, além de fazer modificações estruturais nos compostos, facilitando a pesquisa *in silico*. O *PyMOL* possui uma licença acadêmica gratuita no seu site (MOOERS e BROWN, 2020). Estes *softwares* são muito utilizados pela sua facilidade, segurança sobre os cálculos realizados e por facilitar a predição *in silico* de compostos (KHAN *et al.*, 2021). Portanto, o objetivo deste trabalho é realizar uma revisão bibliográfica sobre a frequência do uso dos *softwares Boviva Discovery Studio* e *PyMOL* para predição e análise da estrutura de compostos *in silico*.

### **METODOLOGIA**

Trata-se de um estudo de revisão bibliográfica realizado em junho de 2022 onde foram utilizados artigos pesquisados nas plataformas de busca *Scientific Eletronic Library Online (SCIELO)*, *PubMed*, *Cell Press* e *Google Acadêmico*. Os descritores utilizados foram: *Boviva Discovery Studio*, *PyMOL* e bioinformática. Como critérios de inclusão foram considerados artigos, teses e dissertações dos últimos cinco anos.

---

<sup>1</sup> Acadêmicos do curso de Farmácia-Centro Universitário Vértice - UNIVÉRTIX

<sup>2</sup> Farmacêutico-Bioquímico (UFOP); Cirurgião Dentista (UNIVÉRTIX); Doutor em Bioquímica Aplicada (Biotecnologia) (UFV); Mestre em Ciências Naturais e da Saúde (UNEC); Especialista em Docência do Ensino Superior (UCAM, RJ), Especialista em Disfunção Temporomandibular e Dor Orofacial (UniBF, Paraná). Professor dos cursos de Farmácia, Psicologia, Enfermagem, Medicina e Odontologia do Centro Universitário Vértice – UNIVÉRTIX.

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nos dias atuais a modelagem de compostos pelos métodos de cristalografia ou ressonância magnética são extremamente caros e restritos a alguns laboratórios. Com esse desafio, a modelagem computacional se fez presente por oferecer *softwares* sofisticados que permitem a predição *in silico* da estrutura de uma maneira muito mais fácil, barata e segura (EKMAN *et al.*, 2021). Para tanto, se observa que o software *Biovia Discovery Studio* permite o carregamento de estrutura de compostos a partir de vários formatos, o mais recomendado é o *Protein Data Bank (PDB)*. Esse software ao abrir a molécula permite ao usuário modificar sua estrutura a partir de uma barra lateral de comandos, sendo possível remover resíduos de aminoácidos e retirar as cadeias desejadas. Uma funcionalidade importante é a predição das coordenadas espaciais de um átomo, resíduo ou molécula desejada, isso é importante caso queira realizar um *docking* molecular (GOGOI; CHETIA; GOGOI e DAS, 2019). Quando é realizado um *docking* o *software* pode ser utilizado como visualizador das interações obtidas, por proporcionar a visualização das coordenadas e das ligações, consituindo um método auxiliar da validação do *docking* (JABIR *et al.*, 2021). O *PyMOL* é um software que permite a visualização de moléculas, seu código é aberto e necessita de uma permissão acadêmica para utilização gratuita. Atualmente, o *PyMOL* é mantido pela empresa Schrodinger(© Schrodinger). Esse aplicativo é considerado bastante seguro e de alta qualidade (LOGANATHAN *et al.*, 2021). Dentre suas funcionalidades, é possível visualizar com profundidade as ligações, das estruturas, através de arquivos no formato depositado no *protein data bank, pdb*. Este *software* é capaz de remover as moléculas de água, facilitando a realização do *docking*, além de possibilitar ao usuário salvar uma imagem ou vídeo das estruturas analisadas para seu dispositivo (SCHIFFRIN; RADFORD; BROCKWELL e CALABRESE 2020). Tanto o *Biovia Discovery Studio* quanto o *PyMOL* são *softwares* de bioinformática que possibilitam a visualização e edição de estruturas de moléculas, sendo importante para o avanço da predição *in silico* de compostos (KHAN *et al.*, 2021). Enfim, com o avanço da biotecnologia esses *softwares* se tornaram de extrema utilidade na área farmacêutica pela possibilidade do manuseio e avaliação das estruturas moleculares (ATHO'ILLAH *et al.*, 2021).

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os aplicativos de bioinformática *Biovia Discovery Studio* e *PyMOL* proporcionam a visualização e edição de estruturas por meio de sua execução. Logo, a utilização desses favorece a triagem *in silico* de compostos pela capacidade preditiva. Além disso, o *Biovia Discovery Studio* possui a capacidade de realizar cálculos importantes na interação de compostos (ATHO'ILLAH *et al.*, 2021).

## REFERÊNCIAS

ATHO'ILLAH, M *et al.* Obteve extrato de soja atenuado proinflatório citocinas expressão modulando ativação TLR3/TLR4 em camundongos diet de alta gordura e alta frutose. **Journal of Ayurveda and Integrative Medicine**. Java Oriental, Indonésia, v. 12, nº 1, p. 43-51, Março de 2021.

EKMAN, S *et al.* Computational modeling - an approach to the development of blood grouping reagents. **Expert Review Hematol.** Brisbane, Australia, v. 14, n° 4, p. 329-334. Abril de 2021

GOGOI, N.; CHETIA, D.; GOGOI, B.; DAS, A. Multiple-targets Directed Screening of Flavonoid Compounds from Citrus Species to find out Antimalarial Lead with Predicted Mode of Action: An In Silico and Whole Cell-based In vitro Approach. **Current Computer-Aided Drug Design.** Dibrugarh, Índia, v. 17, n° 1, p. 69-82. Dezembro de 2019.

JABIR, N *et al.* Concatenação de acoplamento molecular e simulação molecular de BACE-1, ligantes-alvo  $\gamma$ -secretase: em busca do tratamento de Alzheimer. **Annals of Medicine.** Thanjavur, Índia, v. 53, n° 1, p. 2332-2344. Dezembro de 2021.

KHAN, S *et al.* A computational in silico approach to predict high-risk coding and non-coding SNPs of human PLCG1 gene. **PLoS One.** Dhaka, Bangladesh, v. 16, n° 11, p. e0260054. 2021.

KUMAR, S *et al.* Identification of phytochemicals as potential therapeutic agents that binds to Nsp15 protein target of coronavirus (SARS-CoV-2) that are capable of inhibiting virus replication. **Phytomedicine.** Nova Deli, Índia, v.85, n° 1, p. e153317. 2021.

LOGANATHAN, Y *et al.* An Insilico evaluation of phytochemicals from Albizia amara and Phyla nodiflora as cyclooxygenase-2 enzyme inhibitors. **DARU Journal of Pharmaceutical Sciences.** Tamil Nadu, Índia, v. 29, n° 2, p. 311-320, Dezembro de 2021.

MOOERS, B.; BROWN, M. Shortcuts for faster image creation in PyMOL. **Protein Science.** Oklahoma, Estados Unidos, v. 29, n° 1, p. 268-276. Janeiro de 2020.

NOH, M.; FAZALUL, S.; A WAHAB, H.; MOHD, A. Discovery of new targeting agents against GAPDH receptor for antituberculosis drug delivery. **Journal of Basic and Clinical Physiology and Pharmacology.** Penang, Malásia, v. 32, n° 4, p. 715-722. Junho de 2021.

SCHIFFRIN, B.; RADFORD, S.; BROCKWELL, D.; CALABRESE, A. PyXlinkViewer: A flexible tool for visualization of protein chemical crosslinking data within the PyMOL molecular graphics system. **Protein Science.** Leeds, Reino Unido, v.29, n° 8, p. 1851-1857. Agosto de 2020.