

4º Edição

# Workshop em Bioinformática

Venha conhecer e compreender as aplicações  
e implicações da bioinformática

## Resumo de Comunicações

Auditório Pequeno da ESA-IPB  
Escola Superior Agrária de Bragança  
27 e 28 de Abril de 2011



# Desenvolvimento de ferramentas de bioinformática para aplicação em Química Medicinal: MOLA e ChemT

Rui M. V. Abreu<sup>1,2</sup>, Hugo J. C. Froufe<sup>1</sup>, Maria-João R. P. Queiroz<sup>3</sup>,  
Isabel C. F. R. Ferreira<sup>1</sup>

<sup>1</sup> CIMO-ESA, Instituto Politécnico de Bragança, Campus de Sta Apolónia, Apartado 1172, 5301-855 Bragança, Portugal

<sup>2</sup> Instituto de Biotecnologia e Bioengenharia, Centro de Genómica e Biotecnologia, Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro (CGB-UTAD/IBB), 5001-801, Vila Real, Portugal

<sup>3</sup> Centro de Química, Universidade do Minho, Campus de Gualtar 4710-057 Braga, Portugal

O desenvolvimento de novas ferramentas computacionais é uma parte integral da área da bioinformática. A disponibilização destas ferramentas em modalidade de acesso livre permitir o acesso a um maior número de utilizadores e facilita significativamente o seu desenvolvimento pela facilidade de troca de ideias entre utilizadores. Neste trabalho, serão apresentados dois softwares desenvolvidos pelo nosso grupo de investigação: 1) MOLA1 que automatiza o screening virtual de bibliotecas de compostos com baixa massa molar, utilizando as ferramentas de docking AutoDock4 e AutoDock Vina; 2) ChemT2 que permite a geração de bibliotecas de compostos análogos de baixa massa molar, tendo como base uma estrutura química de interesse. Será ainda apresentado um exemplo de screening virtual utilizando a VEGFR2 (Vascular Endothelial Growth Factor Receptor 2) como proteína alvo e uma biblioteca de compostos químicos derivados de tieno[3,2-b]piridinas. Neste exemplo, o MOLA foi utilizado para automatizar o processo de screening virtual e o ChemT para gerar a biblioteca de derivados de tieno[3,2-b]piridinas.

Agradecimentos: FCT (Portugal) e projecto COMPETE/QREN/EU (PTDC/QUI-QUI/111060/2009) pelo apoio financeiro. R.M.V. Abreu agradece à FCT, POPH-QREN e FSE pela bolsa SFRH/PROTEC/49450/2009.

1. Abreu, R. M. V., Froufe, H. J. C., Queiroz, M.-J. R. P., & Ferreira, I. C. F. R. (2010). MOLA: a bootable, self-configuring system for virtual screening using AutoDock4/Vina on computer clusters. *Journal of cheminformatics*, 2(1), 10.
2. Abreu, R. M. V., Froufe, H. J. C., Queiroz, M.-J. R. P., & Ferreira, I. C. F. R. (2011). ChemT, an open-source software for building template-based chemical libraries. SAR and QSAR in environmental research, in press.