

Estudo das relações quantitativas entre a estrutura e a atividade de inibidores da purina nucleosídeo fosforilase de *Schistosoma mansoni* da gliceraldeído-3-fosfato desidrogenase glicossomal de *Trypanosoma* [...]

Pesquisador responsável: [Adriano Defini Andricopulo](#) 

Beneficiário: [Adriano Defini Andricopulo](#) 

Instituição-sede da pesquisa: [Instituto de Física de São Carlos \(IFSC\). Universidade de São Paulo \(USP\). São Carlos, SP, Brasil](#)

Área do conhecimento: [Ciências Biológicas](#) - [Biofísica](#) - [Biofísica Molecular](#)

Linha de fomento: [Auxílio à Pesquisa - Apoio a Jovens Pesquisadores](#)

Processo: 02/03144-9

Vigência: 01 de novembro de 2002 - 31 de outubro de 2006

Bolsa(s) vinculada(s): [06/51167-9 - Triagem biológica e estudos cinéticos de inibidores da purina nucleosídeo fosforilase de *Schistosoma mansoni*](#), BP.IC
[04/07327-6 - Estudos cinéticos e das relações quantitativas entre a estrutura e atividade de inibidores da purina nucleosídeo fosforilase de *Schistosoma mansoni*](#), BP.IC
[04/03586-7 - Estudos cinéticos e das relações entre a estrutura e atividade de inibidores da gliceraldeído-3-fosfato desidrogenase glicossomal de *Trypanosoma cruzi*](#), BP.IC
[03/13731-1 - Estudos estruturais e das relações quantitativas tridimensionais entre a estrutura e a atividade de inibidores da enzima purina nucleosídeo fosforilase bovina e do *Schistosoma mansoni*](#), BP.PD
[02/07691-4 - Estudos das relações quantitativas entre a estrutura e a atividade de inibidores da purina nucleosídeo fosforilase de *Schistosoma mansoni* da gliceraldeído-3-fosfato desidrogenase glicossomal de *Trypanosoma cruzi* e da adenina-fosforribosil-transferase de *Leishmania tarentolae*](#), BP.JP

Publicação FAPESP sobre o auxílio: http://media.fapesp.br/bv/uploads/pdfs/Investindo...pesquisadores_61_87_87.pdf

Assunto(s): [Inibidores de enzimas](#) [Schistosoma mansoni](#) [Trypanosoma cruzi](#) [Doença de Chagas](#) [Leishmaniose](#)

Resumo

Os objetivos principais deste projeto são os estudos das relações quantitativas entre a estrutura e a atividade de inibidores da purina nucleosídeo fosforilase de *Schistosoma mansoni*, da gliceraldeído-3-fosfato desidrogenase glicossomal de *Trypanosoma cruzi* e da adenina-fosforribosil-transferase de *Leishmania tarentolae*, compostos candidatos a protótipos de novos fármacos no tratamento quimioterápico da esquistossomose, doença de Chagas e leishmaniose, respectivamente. Para a realização de nossos objetivos, planeja-se a criação de amplos conjuntos padrões de dados para inibidores das enzimas alvo. Estes conjuntos, contendo os dados de estrutura e atividade inibitória correspondentes, organizados e classificados, serão a base científica para os estudos de modelagem molecular e o desenvolvimento de modelos de QSAR/QSAR 3D, empregando diferentes abordagens e metodologias de QSAR. Os modelos preditivos de QSAR/QSAR 3D, uma vez criados, serão úteis para o planejamento e desenho estrutural de novas moléculas que possuam propriedades farmacoterapêuticas otimizadas, capazes de representarem novas entidades químicas, candidatas a protótipos de novos fármacos na quimioterapia segura das doenças infecto-parasitárias de interesse neste projeto. (AU)