

MATERIAL SUPLEMENTAR

BUSCA VIRTUAL DE COMPOSTOS BIOATIVOS: CONCEITOS E APLICAÇÕES

Erika Piccirillo e Antonia Tavares do Amaral*

Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Avenida Professor Lineu Prestes, 748, 05508-000 São Paulo – SP, Brasil

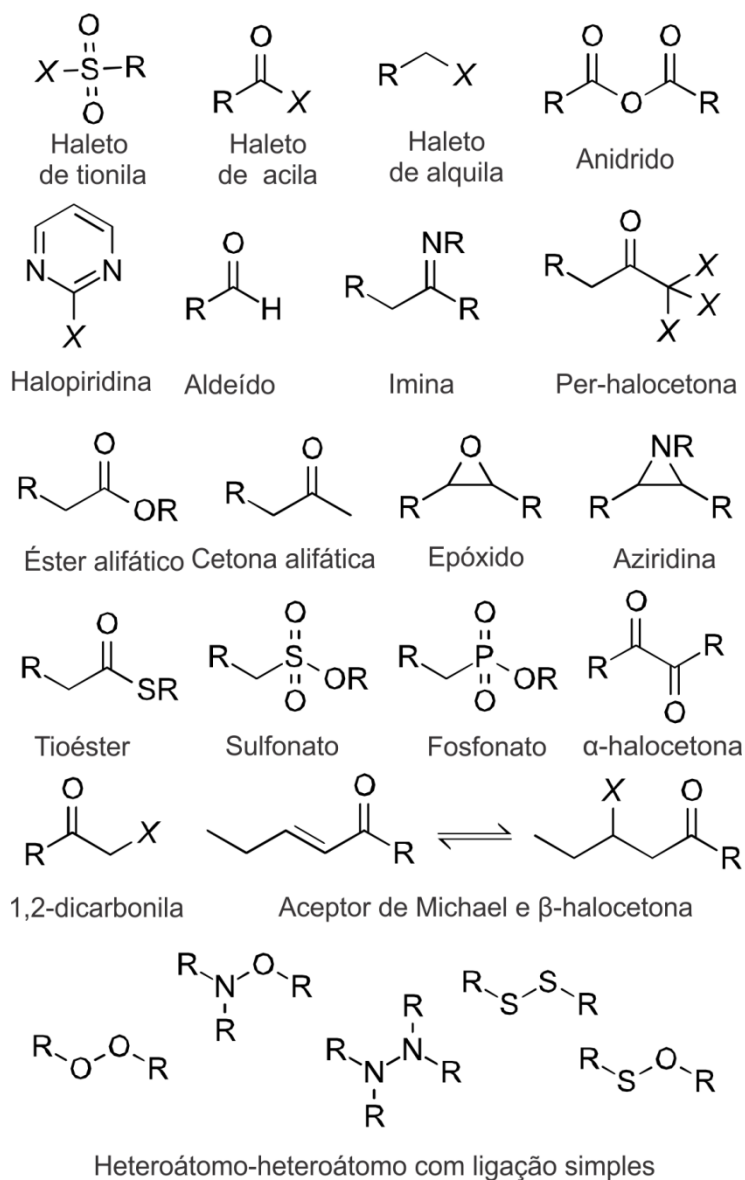


Figura 1S. Representação da estrutura 2D de alguns grupos reativos responsáveis pelos resultados falso-positivos em experimentos *in vitro*. Grupos retirados das publicações de Bologna e Oprea e de Rishton.^{1S,2S}

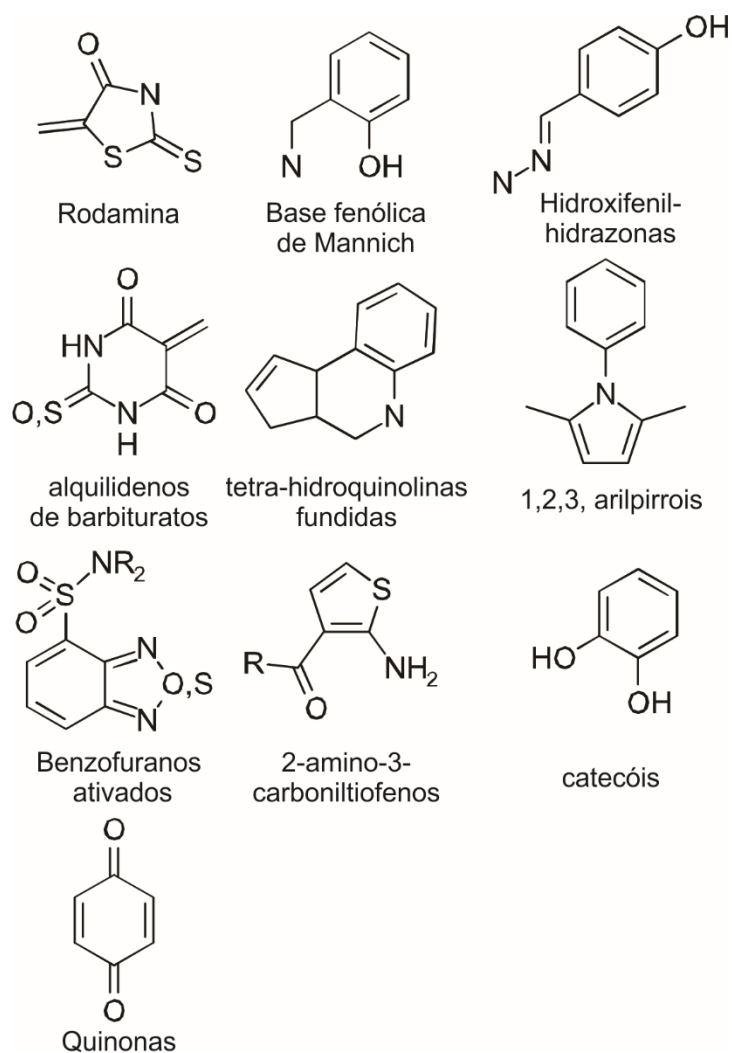


Figura 2S. Representação da subestrutura 2D das 10 classes com compostos capazes de interferir com vários tipos de ensaios, denominados de PAINS (do inglês, Pan Assay INterference compoundS),³⁵ sendo elas: rodaminas, bases fenólicas de Mannich, hidroxifenil-hidrazonas, alquilidenos de barbituratos, tetra-hidroquinolinas fundidas, 1,2,3-arilpirrois, benzofuranos ativados, 2-amino-3-carboniltiofenos, catecóis e quinonas

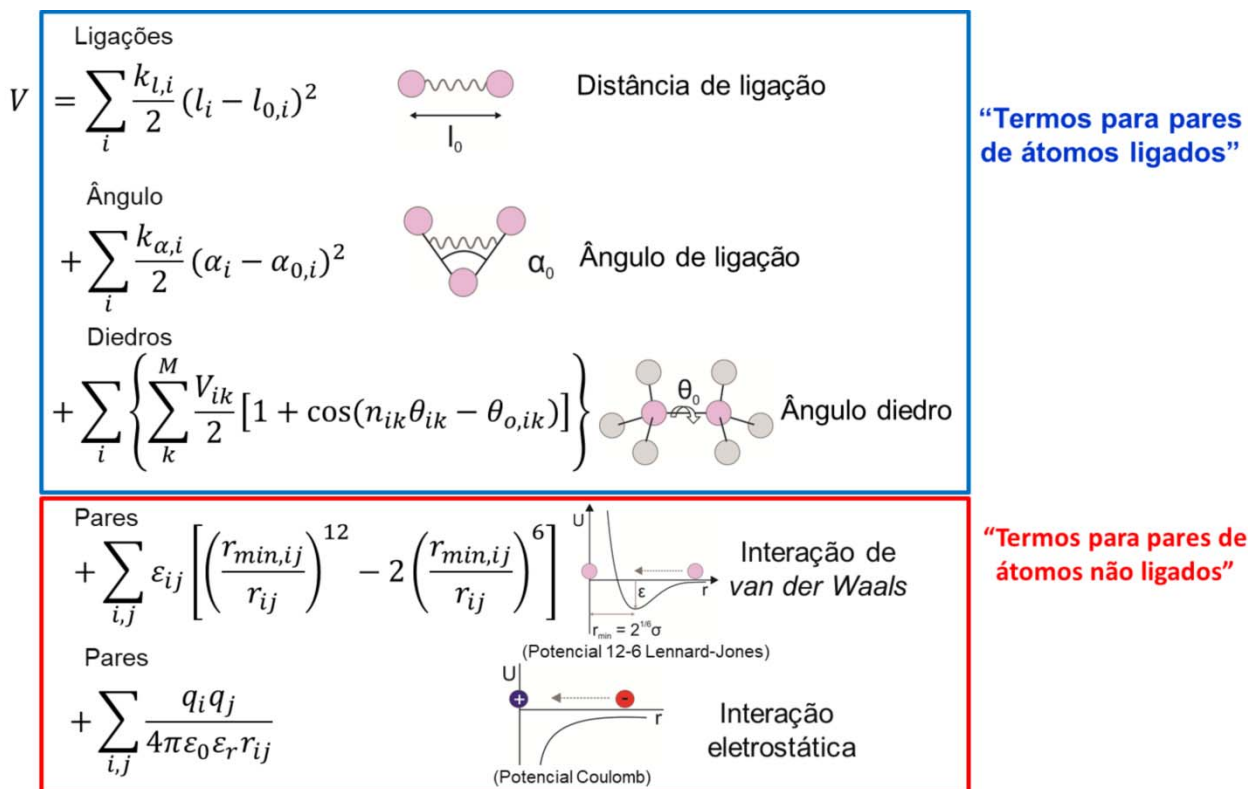


Figura 3S. Representação da equação de um campo de força (V) com termos representando interações, par a par, de átomos ligados (ligação, ângulo e diedro) e entre pares de átomos não ligados (interação de van der Waals e eletrostática).^{4S} Nos três termos referentes aos átomos ligados, temos: i é um par de átomos; l e α representam distância e ângulo de ligação, respectivamente, sendo ambos descritos por potenciais harmônicos com valores de referência l_0 e α_0 e constantes de força k_l e k_α , respectivamente; Θ é o ângulo diedro, descrito por uma série de M cossenos, na qual n_{ik} descreve a multiplicidade do termo k da série, $\Theta_{0,ik}$ é a fase do ângulo e V_{ik} é a energia de barreira. Nos dois termos referentes aos pares de átomos não ligados, temos: i e j são átomos; r_{ij} é a distância entre estes átomos; a interação de van der Waals é descrita por um potencial 12-6 de Lennard-Jones, no qual ε_{ij} é o valor mínimo do vale de energia, r_{min} é a distância de mínimo de potencial ($r_{min}=2^{1/6}r_0$, onde r_0 é a distância na qual potencial = 0) e para interação eletrostática se usa um potencial de Coulomb, no qual q_i e q_j são as cargas parciais dos átomos, ε_0 é a permissividade do espaço livre e ε_r é a permissividade relativa (ou constante dielétrica).^{4S}

REFERÊNCIAS

1. Rishton, G. M.; *Drug Discovery Today* **1997**, 2, 382.
2. Oprea, T. I.; Taboureau, O.; Bologna, C. G.; *J. Comput. Aided. Mol. Des.* **2012**, 26, 107.

3. Baell, J. B.; Holloway, G. A.; *J. Med. Chem.* **2010**, *53*, 2719.

4. De Vivo, M.; Masetti, M.; Bottegoni, G.; Cavalli, A.; *J. Med. Chem.* **2016**, *59*, 4035.



This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License.