

Estudo de Inibidores da Anidrase Carbônica β da *Mycobacterium tuberculosis* por Modelagem Molecular e Análises de Componentes Principais e de Cluster

Study of *Mycobacterium tuberculosis* Carbonic Anhydrase β Inhibitors by Molecular Modeling and Principal Component and Cluster Analyses

Winnie M. A. L. Teixeira,^a Felipe Leite Coelho da Silva,^b  Carlos Mauricio R. Sant'Anna^{*,c} 

^aUniversidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Instituto de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, CEP 23890-000, Seropédica-RJ, Brasil

^bUniversidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Matemática, CEP 23890-000, Seropédica-RJ, Brasil

^cUniversidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Departamento de Química Fundamental, CEP 23890-000, Seropédica-RJ, Brasil

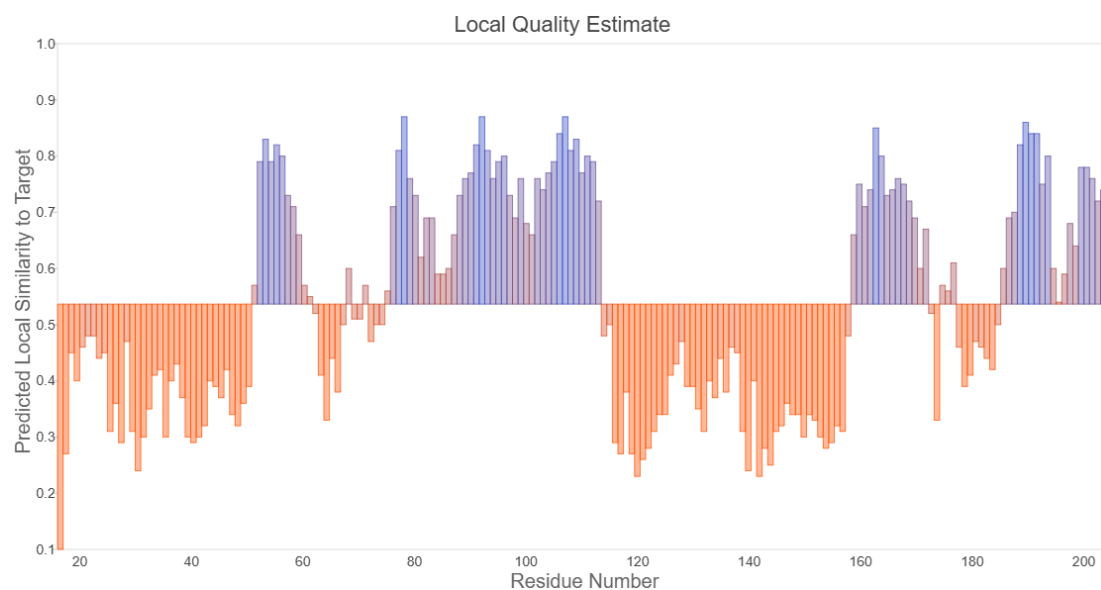
[*santanna@ufrj.br](mailto:santanna@ufrj.br)

• **Modelagem Comparativa da CA de *M. tuberculosis***

A modelagem comparativa foi feita com o servidor Swiss Model (<https://swissmodel.expasy.org/>). Foi usada a sequência primária da estrutura 2A5V e, como molde, a cadeia A da estrutura da CA de *Methanothermobacter thermautotrophicus* contendo em seu sítio ativo o ligante ácido 4-(2-hidroxietil)-1-piperaziniletanosulfônico (Hepes), código 1G5C no PDB (resolução de 2,10 Å).

Template	Seq. Identity	Oligo-state	Resolution	Seq. Similarity	Range	Coverage	GMQE	QMEANDisCo Global
1G5C	24,22	monomer	2,10 Å	0,31	16-205	0,76	0,45	0,54

Target	HHHHHHGPNTNPVAAWKALKEGNERFVAGRPQHPSQSVDRAGLA-AGQKPTAVI
template_upload.1.A	-----IKDILRENQDFRFR-----DLSDLKHSPKLCI
Target	FGCADSRVAA--EIIIFDQGLGDMFVVRTAGHVIDSAVLGSIEYAVTVLNVPLIVV
template_upload.1.A	ITCMDRLIDLLERALGIGRGDAKVIKNAGNIVDDGVIRSAAVAIYALGDNEIII
Target	LGHDSGAVNAALAAINDGTLPGGYVRDVVERVAPSVLLG--RRDGLSRVDEFEQ
template_upload.1.A	VGHTDCGMARLDEDL-----IVSRMRELGVEEEVIENFSIDVLNPNVGDEE
Target	RHVHETVAILMARSSAISERIIAGGSLAIVGVITYQLDDGRAVLRDHIGNIGEEV
template_upload.1.A	ENVIEGVKRLKS-SPLIPE-----SIGVHGLIIDINTGRLKPLYL-----



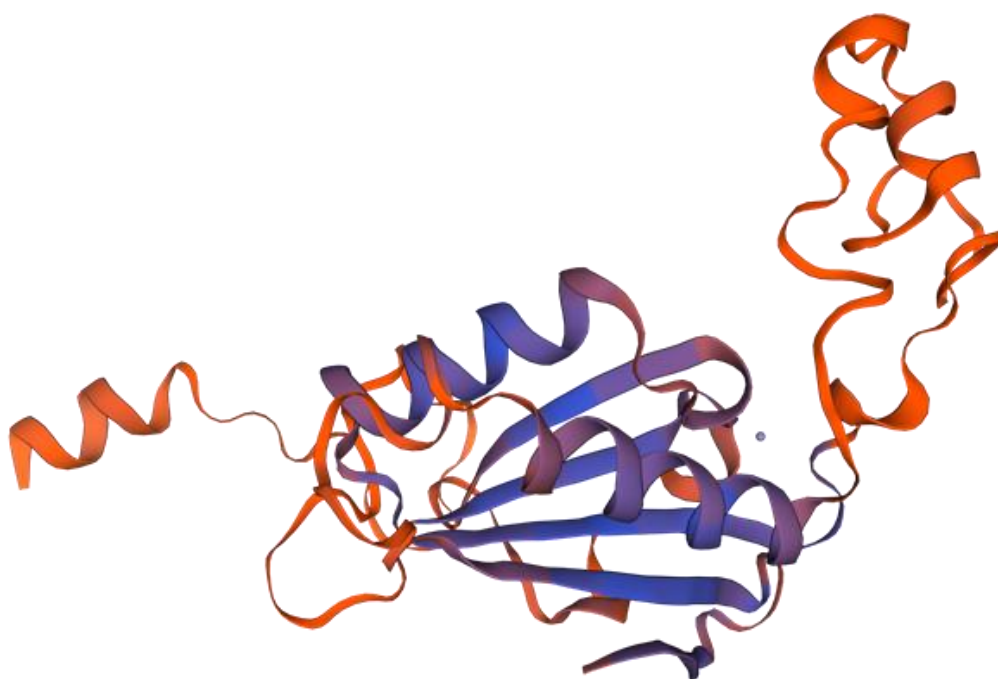


Tabela 1S. ACP- Função GoldScore

Componente Principal	Desvio Padrão	Proporção da Variância	Proporção Acumulada
CP1	3,6214	0,4371	0,4371
CP2	2,3808	0,1890	0,6261
CP3	1,6151	0,0869	0,7130
CP4	1,5067	0,0757	0,7887
CP5	1,2874	0,0552	0,8440
CP6	1,0181	0,0346	0,8785
CP7	0,9056	0,0273	0,9058

Tabela 2S. ACP - Função ChemPLP

Componente Principal	Desvio Padrão	Proporção da Variância	Proporção Acumulada
CP1	3,6240	0,3980	0,3980
CP2	2,4483	0,1816	0,5796
CP3	1,75051	0,09286	0,67250
CP4	1,58521	0,07615	0,74864
CP5	1,35019	0,05524	0,80389
CP6	1,05337	0,03362	0,83751

Tabela 3S. ACP - Função ChemScore

Componente Principal	Desvio Padrão	Proporção da Variância	Proporção Acumulada
CP1	3,3661	0,3541	0,3541
CP2	2,4137	0,1821	0,5362
CP3	1,7066	0,0910	0,6272
CP4	1,6881	0,0891	0,7162
CP5	1,4250	0,0635	0,7797
CP6	1,1765	0,0432	0,8229

Tabela 4S. ACP - Função ASP

Componente Principal	Desvio Padrão	Proporção da Variância	Proporção Acumulada
CP1	3,6536	0,43060	0,4306
CP2	2,3692	0,18110	0,6117
CP3	1,71829	0,09524	0,70693
CP4	1,52833	0,07535	0,78227
CP5	1,32860	0,05694	0,83921
CP6	1,10520	0,03940	0,8786