

Ingredientes naturais e de base natural

Muitos dos projetos desenvolvidos no tópico “Ingredientes naturais e de base natural” têm como objetivo a identificação de compostos bioativos obtidos de matrizes naturais, e a avaliação das suas propriedades bioativas. Nesta edição da SC&T, utilizando ferramentas interativas de visualização, vamos poder observar a estrutura química de alguns compostos bioativos. Também vamos utilizar ferramentas de realidade aumentada para observar a estruturas 3D de proteínas, que são estudadas como potenciais alvos de compostos bioativos.

Atividade 1

Visualização interativa da estrutura de compostos bioativos

O desenho da estrutura de compostos naturais de baixo peso molecular é uma ferramenta muitas vezes necessária quando estamos a estudar as suas propriedades bioativas. Nesta atividade vamos utilizar a tecnologia BIOSIM-Augmented Reality, que permite a visualização interactiva de compostos de baixo peso molecular. Esta tecnologia de Realidade Aumentada permite representar compostos químicos num espaço 3D, usando qualquer dispositivo (computador, smartphone ou tablet), desde que tenha um “browser” e uma câmara.

Atividade 2

Análise 3D da estrutura de proteínas-alvo utilizando ferramentas de realidade aumentada

Para entender a estrutura e função das proteínas, é preciso estudar em detalhe a sua estrutura 3D. Este estudo permite analisar os mecanismos de ação de compostos bioativos como potenciais moduladores da sua atividade. Nesta atividade vamos utilizar ferramentas *in silico* da área científica da bioinformática estrutural, que permitem visualizar e manipular interactivamente as estruturas 3D de proteínas conhecidas. Para isso vamos utilizar os softwares Pymol e ProteinVR, e óculos especializados de realidade aumentada.



