

4-TERPINEOL (-)4TRP COMO CANDIDATO A FÁRMACO PARA A COVID-19

I Simpósio de Microbiologia de Rondônia: Saúde, Ambiente e Inovação., 1ª edição, de 23/03/2021 a 25/03/2021
ISBN dos Anais: 978-65-86861-91-4

BRAZ; LUANA CAMILLA CORDEIRO ¹, AMADOR; VINÍCIUS COSTA ², NÓBREGA; FRANKLIN FERREIRA DE FARIAS ³, MAIA; RAFAEL TRINDADE ⁴

RESUMO

Introdução: No final de 2019, um novo coronavírus (Sars-CoV-2) surgiu na China causando a maior pandemia viral dos últimos tempos. A inexistência de medicamentos específicos ocasionou uma incessante corrida para reposicionamento de fármacos no meio científico, para identificação de moléculas promissoras no tratamento da COVID-19. A NSP9 é uma replicase que está associada a replicação viral do Sars-CoV-2 e, portanto, representa um importante alvo para compostos inibidores. O 4-terpineol é um monoterpeneo com inúmeras propriedades farmacológicas, entre elas atividade antimicrobiana e antiviral. Objetivo: O presente estudo adotou como objetivo fazer simulações de docking molecular entre a NSP9 e (-)4-terpineol. Método: As moléculas foram obtidas em base de dados públicas (PDB e ZINC). Foi utilizado o programa Autodocktools para as simulações de docking, enquanto que as análises das interações e análise visual dos complexos foram realizados nos programas VMD-Visual Molecular Dynamics e DS-Discovery Studio. Resultados: As energias de ligação obtidas tiveram valores negativos variando de -4.39 a -4.19 kcal/mol. O monoterpeneo interagiu com 8 aminoácidos do sítio catalítico da enzima, sendo a maioria hidrofóbicos. Ocorreu a formação de uma ligação de hidrogênio entre a ARG40 e o grupamento hidroxila do ligante. As outras interações foram representadas por ligações do tipo alquil e pi-alquil promovidas por 4 aminoácidos e interações de van der Waals com outros três aminoácidos. Estes resultados indicam uma afinidade entre o ligante e o sítio ativo da enzima. Conclusão: O 4-terpineol é um candidato interessante para ensaios *in vitro* e *in vivo* visando determinar o potencial de inibição viral do Sars-CoV-2.

PALAVRAS-CHAVE: Bioinformática estrutural e aplicada, Inibição viral, Modelagem molecular, Prospecção de fármacos

¹ Instituto Federal da Paraíba, luana.braz@ifpb.edu.br

² Universidade Federal de Pernambuco, vinicius.costa.amador@gmail.com

³ Universidade Federal de Campina Grande, franklin.ferreira@ufcg.edu.br

⁴ Universidade Federal de Campina Grande, rafael.trindade@ufcg.edu.br