

## INTERAÇÕES ENTRE A CAPSAICINA E UMA REPLICASE DO SARS-COV-2

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

**MAIA; RAFAEL TRINDADE <sup>1</sup>, FERNANDES; AMANDA CRISTIANE GONÇALVES <sup>2</sup>**

### RESUMO

No final de 2019 uma misteriosa virose surgiu em Hubei, província chinesa e em janeiro de 2020 foi constatado que se tratava de uma síndrome respiratória causada por um novo coronavírus, o SARS-CoV-2. A doença foi batizada de COVID-19 e tornou-se a maior pandemia das últimas décadas, causando milhões de mortes no mundo inteiro. Devido a isto, uma alucinante corrida por vacinas e fármacos antivirais iniciou-se com o intuito de combater a doença. Um dos alvos mais promissores para fármacos neste vírus é a enzima de replicação viral NSP9 (do inglês *Non-structural protein 9*), enzima específica da família *Coronaviridae* e indispensável para a replicação viral. A capsaicina é um composto ativo presente em pimentas do gênero *Capsicum*, responsável pela sensação de queimadura e ardência em diversos tecidos humanos. Por se tratar de uma molécula de defesa natural, a capsaicina possui propriedades antimicrobianas e antivirais. Neste contexto, o presente estudo teve por objetivo identificar interações entre a capsaicina e a replicase NSP9 através da técnica de *docking* molecular. Para tal, a estrutura tridimensional da NSP9 foi obtida através do PDB (ID 6W4B) e a da capsaicina pelo PUBCHEM (1548943). As simulações de *docking* molecular foram realizadas no programa AutoDock com grid de 126 x 126 x 126 Å de volume centrado no receptor. Foi utilizado o algoritmo genético Lamarckiano (LGA) com os parâmetros padrão do programa. Como resultado foram obtidos 10 complexos, que foram analisados visualmente através dos programas *VMD-Visual Molecule Display* e *DS-Discovery Studio*. O melhor complexo obtido apresentou energia intermolecular de -9,17 kcal/mol, energia de ligação de -6,18 Kcal/mol e constante de inibição de 29,31 µM. Estes resultados apontam que há uma afinidade entre as moléculas e que a capsaicina possui potencial de inibição enzimática. Pela análise visual foi constatado interações do tipo van der Waals (MET13, GLY39, PHE41, PHE57, ASP61, GLY62, THR68), ligações de hidrogênio (ARG40, PRO58, SER60), alquil (VAL42, LYS59, ILE66), ligação carbono-hidrogênio (LYS59) e pi-sigma (PRO58). Todos os aminoácidos que interagem com a capsaicina fazem parte do suposto sítio catalítico da NSP9. Esses resultados apontam para um potencial de ação virucida e/ou virustática da capsaicina para o SARS-CoV-2. Sendo assim, é possível que este composto possa apresentar utilidade terapêutica e preventiva no combate à COVID-19.

**PALAVRAS-CHAVE:** COVID-19, BIOINFORMÁTICA, DOCKING, ANTIVIRAL

<sup>1</sup> UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE, rafael.rafatrin@gmail.com

<sup>2</sup> UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE, mailto:amandafernandestt@gmail.com

