SIMICRON
ISBN: 978-65-86861-91-4

ANÁLISE IN SÍLICO DO CADINENO E VALENCENO COMO POTENCIAIS INIBIDORES DA NS5 RDRP DO ZIKA VÍRUS

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

OLIVEIRA; NATÁLIA RAQUEL SILVA OLIVEIRA [1], SILVA; TALES NATAN FREITAS DA [2], FARIAS; HENRIQUETA MONALISA [3], MAIA; RAFAEL TRINDADE [4], NÓBREGA; FRANKLIN FERREIRA DE FARIAS [5]

RESUMO

O vírus a Zika (ZIKV) é um arbovírus pertencente à família Flaviviridae, gênero *Flavivirus. Atualmente, não há vacinas ou medicamentos disponíveis para o tratamento da infecção ocasionada pelo ZIKV.* Um estudo recente evidenciou a elucidação da estrutura tridimensional de uma polimerase de RNA dependente de RNA do ZIKV NS5, cuja função está associada a replicação viral, mostrando-se como um potencial alvo para possíveis estudos referentes a inibição do vírus. Assim, o objetivo do estudo é selecionar in sílico possíveis inibidores da proteína de replicação NS5. O método *in silico* utilizado pela pesquisa foi o *docking* molecular, realizado pelo programa AutoDock, responsável por gerar os cálculos de *docking* do atracamento molecular entre os ligantes selecionados pelo estudo e a proteína NS5. Dessa forma, a estrutura da proteína foi obtida pelo banco de dados PDB- *Protein Data Bank*, através do código de acesso 5u0b e as estruturas dos compostos valenceno e cadineno foram obtidas pelo banco de dados PubChem. Para a análise dos resultados gerados pelo AutoDock, foram utilizados 3 parâmetros, sendo eles: análise visual, afim de identificar se houve interação direta dos compostos com o sítio ativo da proteína, energia intermolecular final (EIF) e energia livre (ΔG). Os resultados dos cálculos de *docking* da interação entre o cadineno e a proteína NS5 demonstraram valores de energia livre e energia intermolecular final expressamente negativos, variando entre -4,58 e -5,11 kcal/mol para a energia livre e -4,7 e -5,48 para a energia intermolecular final. Os cálculos de *docking* entre a interação do valenceno e a proteína apresentaram valores de energia livre entre -4,21 e -5,18 kcal/mol, e valores de energia intermolecular final variando entre -4,86 e -5,35. A partir da análise visual foi possível identificar que o valenceno e cadineno interagiram de forma direta com o sítio ativo da NS5 através de ligação de van der Waals. O valenceno e cadineno apresentaram valores negativos para energia intermolecular final e energia livre, indicando que a interação ocorrida é energeticamente favorável, sugerindo que há afinidade entre as moléculas dos compostos com a proteína NS5. Houve interação direta dos ligantes com o sítio ativo da proteína, reafirmando a afinidade entre as moléculas, sugerindo uma possível atividade inibitória dos ligantes frente a NS5. Dessa forma, os compostos estudados, valenceno e cadineno, apresentaram-se como moléculas promissoras para futuros estudos que visem desenvolver um tratamento eficaz para a infecção ocasionada pelo ZIKV.

PALAVRAS-CHAVE: Arboviroses, Biologia Computacional, Flavivírus.

[1] Universidade Federal de Campina Grande, raquelnatalia56@gmail.com
[2] Universidade Federal de Campina Grande, tales.freitas1@yahoo.com.br
[3] Universidade Federal de Campina Grande, henriquetamonalisa@gmail.com
[4] Universidade Federal de Campina Grande, rafael.rafatrin@gmail.com
[5] Universidade Federal de Campina Grande, nobrega.franklin13@gmail.com

[1] Universidade Federal de Campina Grande, raquelnatalia56@gmail.com
[2] Universidade Federal de Campina Grande, tales.freitas1@yahoo.com.br
[3] Universidade Federal de Campina Grande, henriquetamonalisa@gmail.com
[4] Universidade Federal de Campina Grande, rafael.rafatrin@gmail.com
[5] Universidade Federal de Campina Grande, nobrega.franklin13@gmail.com