

APLICAÇÃO DO DOCKING MOLECULAR NO ESTUDO DO POTENCIAL INIBITÓRIO DA PROTEÍNA DHFR DE CÂNDIDA ALBICANS COM USO DA AUCUBINA

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

GARCIA; VALDECYA APARECIDA OLIVEIRA ¹, FARIAS; HENRIQUETA MONALISA ², DANTAS; SEBASTIÃO GILTON ³

RESUMO

Doenças e infecções fúngicas tem atraído a atenção de pesquisadores e órgãos de saúde pública devido a quantidade de ocorrências, o índice de casos relacionado ao fungo *Cândida Albicans* tem sido alvo dessa atenção. Em uma recente pesquisa foi elucidada a estrutura tridimensional da *Candida albicans* DHFR (di-hidrofolato redutase fúngica), que tem como função a participação ativa na via folatio catalisando a redução do diidrofolato a tetraidrofolato, esse metabolito é essencial para biossíntese de DNA e proteínas. Assim, estudos teórico-computacionais são fundamentais para sinalizar possíveis inibidores desta enzima que funcionem como antifúngicos. A pesquisa atual tem como objetivo realizar uma análise *in silico* da aucubina como um potencial inibidor da proteína DHFR. A metodologia iniciou por meio de uma análise da estrutura da DHFR, assim como seu sítio ativo, e estrutura foi obtida no banco de dados *Protein Data Bank- PDB* através do código de acesso 1A19 e cuja estrutura foi analisada visualmente pelo *Software Discovery Studio*. Em seguida houve uma busca na literatura e nos bancos de dados de moléculas por possíveis inibidores, no qual o metabolito secundário aucubina presente na planta Jaramataia, foi definido para ser testado como um provável inibidor da proteína, a molécula foi obtida no banco de dados Chempider; e por fim, simulações de *Docking*, através do programa AutoDock. De acordo com os resultados obtidos nas simulações, a aucubina apresentou interação direta com aminoácidos do sítio ativo da proteína, tais aminoácidos são: PHE36, ILE112, ILE9, GLU32 e MET25, além disso demonstrou energia livre de ligação (critério para avaliação dos resultados) negativa em todos os complexos/conformações atingindo -4.14Kcal/mol de valor energético de energia livre de ligação, enquanto a energia intermolecular que também é um critério para avaliação dos resultados apontou -7.13 Kcal/mol como energia mais baixa, valores expressivamente negativos, que implicam na afirmação que a ligação entre o ligante aucubina e o receptor DHFR é termodinamicamente favorável, logo com mais estudos em âmbito experimental é possível levantar a hipótese da utilização do metabolito secundário aucubina como antifúngico para complicações ocasionadas por *Candida Albicans*.

PALAVRAS-CHAVE: Aucubina, Bioinformática, Docking Molecular

¹ UFCG, aparecida.valdecya@gmail.com

² UFCG, henriquetamonalisa@gmail.com

³ IFRN, gilton.dantas@ifrn.edu.br