

PROSPECÇÃO IN SILICO DE FÁRMACOS INIBIDORES DA ENZIMA DE REPLICAÇÃO VIRAL NS5 RDRP DO VÍRUS DO NILO OCIDENTAL: UMA ARBOVIROSE EMERGENTE.

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

MEDEIROS; INGRID SAVANNA ELPÍDIO ¹, MAIA; RAFAEL TRINDADE ²

RESUMO

A Febre do Nilo Ocidental (WNV) é uma doença causada por um vírus do gênero Flavivírus, considerada uma grave ameaça à saúde pública, por possuir uma ampla distribuição global, apresentando uma taxa de mortalidade superior a 30%. O Brasil teve seu primeiro caso notificado em 2014 e até o momento não existem vacinas nem drogas terapêuticas aprovadas e comercializadas para tratar esta enfermidade. Diante disso, com o objetivo de descobrir compostos com potencial atividade antiviral contra WNV, utilizou-se a metodologia de docking molecular mediante o programa AutoDock e os Softwares Discovery Studio e VMD - Visual Molecular Dynamics. Esta técnica permite a elucidação da estrutura tridimensional da proteína NS5 RdRp e a triagem de fármacos através de experimentos *in silico* de interação entre proteína-ligante gerando resultados rápidos e a um baixo custo. Ademais, a validação da estrutura proteica foi feita através de uma análise da proteína no software Procheck, através do gráfico de Ramachandran. Quanto aos ligantes, entre os escolhidos, utilizou-se apenas o Cefadroxil, o ácido 3-hidroxi-butírico e o P-cimeno para a realização dos primeiros dockings. Ambos apresentaram bons valores energéticos de acordo com os parâmetros de ΔG e EIF. Contudo não houve interação com o sítio ativo da proteína, o que significa que os compostos não possuem potencial antiviral. Quanto à literatura, ficou evidente que estes compostos são mais utilizados como bactericidas, antifúngicos, anti-inflamatório, entre outras propriedades.

PALAVRAS-CHAVE: Palavras-chave: Arbovirose, Docking molecular, Saúde pública.

¹ Universidade Federal de Campina Grande, savanajp@hotmail.com

² Universidade Federal de Campina Grande, rafael.rafatrin@gmail.com