

Química

## ESTUDOS IN SILICO DE POTENCIAIS INIBIDORES DE PROTEASE DE SARS-COV-2

Henrique Fernandes Silva - 7º módulo de Química, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq

Alexandre Alves de Castro - Coorientador DQI, UFLA

Elaine Fontes Ferreira da Cunha - Orientador DQI, UFLA - Orientador(a)

### Resumo

Em 2019, na cidade de Wuhan, na China, um novo coronavírus (SARS-CoV-2) foi identificado e estabelecido como uma potencial ameaça global. O vírus se espalhou rapidamente e culminou em uma pandemia em todo o mundo ao longo do ano de 2020 e que se estabelece até então. Para o combate ao novo coronavírus, diversos cientistas e pesquisadores trabalharam incansavelmente até produzirem dados suficientes para inibir a atividade viral. A Mpro (Main Protease – Protease Principal) do SARS desempenha um papel fundamental no ciclo de replicação viral e é um alvo potencial para o desenvolvimento de inibidores. Para essa tarefa, os métodos computacionais podem contribuir efetivamente para descobertas e desenvolvimento de novos medicamentos para o combate ao SARS-CoV-2. Trabalhos e publicações anteriores a respeito da inibição da atividade viral do SARS-CoV serviram de base para o estudo de compostos ativos contra o SARS-CoV-2, uma vez que o alinhamento das sequências das duas enzimas Mpro possui uma similaridade de 86,125%. O ancoramento molecular (docking) foi realizado com o software Molegro Virtual Docker (MVD®). Os resultados obtidos mostraram que os biflavonóides de *Torreya nucifera* apresentaram melhor estabilidade para Mpro do SARS-CoV e SARS-CoV-2. Neste caso, três ligantes apresentaram energia de interação de -235,09 kcal mol<sup>-1</sup>, -223,42 kcal mol<sup>-1</sup> e -222,39 kcal mol<sup>-1</sup>, respectivamente, para SARS-CoV. De maneira semelhante, esses ligantes apresentaram energia de interação de -228,89 kcal mol<sup>-1</sup>, -225,10 kcal mol<sup>-1</sup> e -234,62 kcal mol<sup>-1</sup>, respectivamente, para SARS-CoV-2. Um quarto biflavonóide também apresentou uma boa afinidade com ambas as proteínas, mas esta carece do grupo metóxi, o que significa que o grupo metóxi para os biflavonóides evidenciou ser o fator determinante para a estabilidade. Os resultados do trabalho indicam que os potenciais inibidores da Mpro do SARS-CoV podem ser efetivos contra a Mpro do SARS-CoV-2. Portanto, nossas pesquisas mostraram-se eficazes e poderão servir de base para maiores projetos visando a atividade viral do SARS-CoV-2, que já causou inúmeros problemas para a humanidade.

Palavras-Chave: Inibidores, SARS-CoV, SARS-Cov-2.

Instituição de Fomento: CNPq

Link do pitch: [https://youtu.be/\\_Qn3VDBZC7I](https://youtu.be/_Qn3VDBZC7I)