

# ANÁLISE DE ANCORAGEM MOLECULAR DE MONOTERPENOS FRENTE A PROTEÍNA GP63 DA LEISHMANIA (VIANNIA) BRAZILIENSIS

I Simpósio de Microbiologia de Rondônia: Saúde, Ambiente e Inovação., 1<sup>a</sup> edição, de 23/03/2021 a 25/03/2021  
ISBN dos Anais: 978-65-86861-91-4

CASTRO; FRANCIELE MAIARA DE ARAÚJO <sup>1</sup>, FARIAS; HENRIQUETA MONALISA <sup>2</sup>

## RESUMO

A leishmaniose representa um conjunto de enfermidades diferentes entre si, que por sua vez são consideradas infecciosas e não contagiosas, afetando os indivíduos mais pobres do mundo, estando associada à desnutrição, ao deslocamento da população, moradia precária, um sistema imunológico fraco, dentre outros fatores. Nesse sentido, *A Leishmania (Viannia) braziliensis* é o principal agente etiológico mais frequente da leishmaniose tegumentar americana no Brasil, além de que, a interação entre o parasito/hospedeiro é permitida por meio de uma leishmanolisina (gp63), isto é, uma glicoproteína de superfície de caráter cristalino, que apresenta um átomo de zinco constituinte do sítio catalítico, do qual, está coordenado às cadeias laterais da His251, His255 e His321. Dessa forma, o objetivo deste trabalho foi analisar *in silico* a interação dos monoterpenos (Z)-β-ocimeno e (E)-β-ocimeno como possíveis agentes antiparasitários, utilizando como alvo bioquímico a proteína gp63. A estrutura molecular da proteína gp63 de *L. (V) braziliensis* foi adquirida através do banco de dados Protein Model Database (PMDB) por meio do código de acesso: PM0078901, enquanto que, para a obtenção da estrutura molecular dos ligantes (Z)-β-ocimeno e (E)-β-ocimeno foi adquirida pelo banco de dados ChemSpider. Em relação ao estudo *in silico* foi realizado o docking molecular proteína-ligante no programa Autodock 1.5.6 e a partir disso, foram geradas 10 conformações tridimensionais, pelo qual, três parâmetros foram considerados mais importantes para a busca do objetivo proposto, a Energia Livre de Ligação (ELL), a Energia Intermolecular Final (EIF) ambas em kcal/mol e por último, a interação direta entre os compostos e o sítio ativo da leishmanolisina através do software PyMol. Diante da simulação do docking molecular foi possível observar que a menor Energia Livre de Ligação (ELL) calculada para o (Z)-β-ocimeno e (E)-β-ocimeno correspondeu respectivamente a -2,89 kcal/mol e -2,74 kcal/mol, enquanto que, a menor Energia Intermolecular Final (EIF) resultou em -4,38 kcal/mol e -4,23 kcal/mol, nesta ordem. Vale salientar que, quanto mais negativo for o valor das energias descritas acima pode-se afirmar que é mais termodinamicamente favorável a existência das moléculas em uma conformação do que separadas. A respeito da interação direta entre (Z)-β-ocimeno e o sítio ativo da proteína alvo, este obteve resultados promissores, pelo qual, o que se destacou foi a conformação tridimensional 2 com uma distância entre ambos (sítio e ligante) de 3,7 Å. Nessa conformação, houve interações de Van der Waals de forma predominante entre os carbonos do ligante e os átomos do resíduo His251. Entretanto, não houve interação direta entre (E)-β-ocimeno e gp63 para nenhuma das dez conformações analisadas. Desse modo, pôde-se perceber que apesar de (Z)-β-ocimeno e (E)-β-ocimeno constituírem da mesma forma molecular, as diferentes conformações no espaço entre o sítio ativo da leishmanolisina e do (E)-β-ocimeno não apresentou ancoragem molecular, todavia, o (Z)-β-ocimeno resultou em ancoragem molecular com o sítio ativo da proteína no resíduo His251, predizendo dessa maneira, um potencial inibidor para a *Leishmania (Viannia) braziliensis*.

**PALAVRAS-CHAVE:** DOCKING MOLECULAR, CONFORMAÇÕES TRIDIMENSIONAIS, LEISHMANOLISINA.

<sup>1</sup> Universidade Federal de Campina Grande, francielecastroufcg@gmail.com

<sup>2</sup> Universidade Federal de Campina Grande, henriquetamonalisa@gmail.com

