

RESUMO

A Covid-19 originou-se na província de Hubei na China em dezembro de 2019 após mutação do vírus SARS-CoV. A sua alta transmissibilidade fez com que a Organização Mundial da Saúde (OMS) decretasse estado de pandemia três meses após sua descoberta, em março de 2021. Este vírus possui, dentre as suas proteínas não estruturas, a NSP9, com alta conservação funcional referente à síntese viral e presente somente nesta família viral, não causando perigo algum ao organismo humano pela sua especificidade, sendo este o receptor determinado para possíveis fármacos. Já o composto 1,8-cineol, monoterpeno com ação antiviral conhecida em vírus da diarreia bovina (BVDV), foi a molécula alvo para procura de análogos para uso como ligantes no docking molecular, prática in silico usada para análise de interações entre estruturas, receptor-ligante, afim de predizer o comportamento destas in vivo. Assim, objetiva-se com o presente trabalho o estudo de inibidores da proteína NSP9 de modo computacional. Por conseguinte, usou-se o Autodock para as simulações de docking, VMD e Discovery Studio para visualização das conformações obtidas, Ghecom para análise de sítio ativo do receptor e bancos de dados para obtenção das moléculas, como o Zinc Data-base, Chemspider e Protein Data Bank. Foram utilizadas duas estruturas como ligantes no docking, (\pm) – Eucaliptol e Eucaliptol – Antisséptico, posteriormente foi gerado pelo Autodock dez conformações de cada uma das duas estruturas e selecionadas as duas melhores de cada agrupamento, observando a energia de ligação (Kcal/mol), energia intermolecular (Kcal/mol), constante de inibição (μ M) e ligações de hidrogênio para determinação do encaixe mais favorável entre receptor-ligante. Dentre as quatro conformações, as duas com o (\pm) – Eucaliptol apresentou -6,43 como energia de ligação e intermolecular, 19,2 e 19,26 como constante de inibição, ligação de hidrogênio entre a Serina 6 da cadeia A do receptor com o Oxigênio do ligante, além de interação de Van der Waals, π -Aquila e Aquila. Com o outro análogo, Eucaliptol – Antisséptico, notou-se o valor de -6,22 como energia de ligação e intermolecular, 27,44 e 27,57 como constante de inibição, ademais de interações de Van der Waals, π -Aquila, Aquila e π -Sigma em comum nas duas configurações. Apesar de variações encontradas no resultado dos programas Autodock e Discovery Studio em relação a ligação de hidrogênio de uma das conformações do (\pm) – Eucaliptol, pode-se atentar que, *in silico*, todas as quatro conformações mostram-se promissoras com bom nível de afinidade entre si, selecionada como melhor complexo o (\pm) – Eucaliptol dentre os dois ligantes simulados. Com base na observação dos resultados do programa Discovery, o aminoácido da Serina 6 da cadeia A como aminoácido mais promitente na qualidade de resíduo âncora, por estar em todos os complexos atuando nas forças de Van der Waals e na ligação de hidrogênio em um dos complexos. Juntamente a isto, é altamente relevante o estudo da estrutura molecular na triagem dos ligantes, através de busca nos dados da literatura existente, para se conjecturar um provável nível de afinidade do complexo, pois influenciam significativamente no agrupamento dos compostos.

PALAVRAS-CHAVE: 1, 8-cineol, docking molecular, Covid-19, NSP9, eucaliptol.

¹ Universidade Federal de Campina Grande, deborasouza.santos@outlook.com

² Universidade Federal de Campina Grande, nobrega.franklin13@gmail.com

³ Universidade Federal de Campina Grande, rafael.rafatrin@gmail.com