

ESTUDO DO POTENCIAL ANTIVIRAL DA PLANTA ALECRIM DO CAMPO (*BACCHARIS DRACUNCULIFOLIA* DC.) NO BLOQUEIO DA AÇÃO DA PROTEÍNA NSP9 DO SARS-COV-2 A PARTIR DE DOCKING MOLECULAR

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

SANTOS; Débora Souza dos¹, NÓBREGA; Franklin Ferreira de Farias², MAIA; Rafael Trindade³

RESUMO

O estudo in silico através de docking molecular é uma ferramenta de predição, neste caso, de atividade terapêutica que utiliza a interação entre o receptor, NSP9, e o ligante, alecrim do campo, para sinalizar possível potencial in vitro e in vivo. Assim, na presente pesquisa, o receptor, NSP9 do SARS-CoV-2, é uma proteína não estrutural com alto teor de conservação possuindo atividade funcional relativa à replicação viral e ligação com a célula hospedeira. Já o alecrim do campo, ligante, possui grande uso na medicina popular para tratamento de diversas enfermidades geradas por vírus, dentre as quais o poliovírus, herpes vírus bovino e suíno. Objetiva-se identificar elementos da composição do óleo essencial da *Baccharis dracunculifolia* responsáveis por sua ação antiviral e sua eventual ação contra o SARS-CoV-2. Metodologicamente, após especificação da composição do óleo essencial na literatura, tais moléculas foram coletadas em bancos de dados, ZINC Data-base, Pubchem e Chemspider, verificando as próprias substâncias (α -pineno, β -pineno, β -mirceno, limoneno, β -cariofileno, isocariofileno, germacreno D, germacreno B, nerolidol, espatulenol, δ -cadinol) e análogas a estas. Em seguida foi realizado docking e análise dos complexos obtidos pelos programas Autodock, VMD e Discovery Studio, examinando nos resultados sua energia de ligação (E.L.) (Kcal/mol), energia intermolecular (E.I.) (Kcal/mol), constante de inibição (C.I.) (μ M) e ligações de hidrogênio (L.H.). Os dois complexos de cada ligante com interação mais enérgica com o receptor foram: espatulenol com 8,51 e 8,57 de C.I., -7,21 e -7,22 de E.I., -6,91 e -6,92 de E.L., L.H. nos dois complexos entre a Valina 8 da cadeia B da NSP9 com o Oxigênio do ligante; molécula análoga ao cadinol, trans-Cadinol, com 7,89 e 12,23 de C.I., -7,56 e -7,3 de E.I., -6,96 e -6,7 de E.L., L.H. não estava presente no primeiro agrupamento, já no segundo aconteceu entre a Prolina 58 da cadeia B do NSP9 com oxigênio do ligante; e germacrenona, análoga ao germacreno β , com C.I. de 36,81 e 40,3, -6,65 e -6,59 de E.I., -6,05 e -6,0 de E.L., com duas L.H. no primeiro encaixe entre Valina 42 e Arginina 50, da cadeia A, com oxigênio e nitrogênio, o segundo não apresentou L.H. Assim, observa-se in silico, não só, potencial do uso do alecrim do campo no combate a Covid-19, como as três moléculas presentes na composição do óleo essencial responsáveis por esta ação antiviral, possuindo estas as interações mais favoráveis dentre as demais com a NSP9, evidenciando baixas C.I., E.L. e E.I., além da presença entre a maioria de L.H., que reflete em ligações mais estáveis. Logo, apesar de necessitar de mais estudos que comprovem efetividade sobre o SARS-CoV-2, pode-se afirmar pelos dados de literatura já existente com outros vírus que *Baccharis dracunculifolia* possui potencial terapêutico para COVID-19.

PALAVRAS-CHAVE: *Baccharis dracunculifolia* DC., alecrim do campo, docking molecular, SARS-CoV-2, NSP9.

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