

# PROSPECÇÃO DE MOLÉCULAS INIBIDORAS DA PROTEASE PRINCIPAL DO SARS-COV-2 ATRAVÉS DE TRIAGEM VIRTUAL COM CONJUNTO CONFORMACIONAL

XIII Encontro de Pesquisa e Pós-Graduação

Francisca Jessica Penha Ribeiro, Maria da Conceição Ferreira de Oliveira, Geancarlo Zanatta

Em 2019, na cidade de Wuhan na China, foi identificado o novo coronavírus em que os pacientes infectados apresentavam sintomas que eram relacionados à pneumonia como: febre, tosse seca e dispnéia progressiva. Devido à alta taxa de letalidade dessa síndrome a procura por um fármaco ou uma vacina para combater-lá é de suma importância. Dentre os alvos terapêuticos está a protease principal do SARS-Cov-2 (Mpro), a qual é a principal protease ligada à replicação viral. A Mpro possui um resíduo de cisteína que é essencial para a atividade catalítica, e o SARS-CoV-2 Mpro como já relatado na literatura possui inibidores com centro eletrofílico (como um aldeído ou uma  $\alpha$ -cetoamida) que captura o tior da cisteína. Neste trabalho foi utilizada a ferramenta computacionais de ancoramento molecular com conjunto conformacional (ensemble docking) ([dinc-covid.kavraklab.org](http://dinc-covid.kavraklab.org)) para triar compostos de origem vegetal com potencial de inibição da Mpro. Até o momento, foram analisadas a interação de 106 moléculas nutracêuticas com distintas conformações do sítio catalítico da Mpro, identificadas através de dados experimentais e dinâmica molecular com campos de força GROMOS53a6 e CHARMM36. Em seguida serão realizadas simulações para avaliar a estabilidade dos compostos identificados, bem como, cálculos de energia livre de interação. Os resultados encontrados serão utilizados em estudos futuros para guiar o desenho racional de novos agentes terapêuticos. Agradecimentos ao grupo de pesquisa, a Universidade Federal do Ceará e a instituição de fomento CAPES.

Palavras-chave: Coronavírus. Triagem virtual. SARS-Cov-2. Mpro.