

AVALIAÇÃO DA ATIVIDADE ANTIMICROBIANA DO ANLODIPINO FRENTE S. AUREUS RESISTENTES À METICILINA POR DOCAGEM MOLECULAR

XV Encontro de Pesquisa e Pós-Graduação

Amanda Dias Barbosa, Vitória Pessoa de Farias Cabral, Daniel Sampaio Rodrigues, Lara Elloyse Almeida Moreira, Emmanuel Silva Marinho, Cecilia Rocha da Silva

Introdução: A busca por novos antimicrobianos é uma das prioridades da Organização Mundial da Saúde tendo em vista o cenário crescente da resistência bacteriana. Nesse sentido, o uso de técnicas que auxiliem na busca por novas moléculas é fundamental, sendo a docagem molecular uma importante ferramenta para prever a atividade de uma droga ou elucidar possíveis alvos biológicos. **Objetivo:** Avaliar a atividade antimicrobiana do anlodipino frente *S. aureus* utilizando docagem molecular. **Métodos:** A estrutura química do anlodipino foi obtida no repositório Pubchem por meio do CID2162, o confômero de menor energia foi salvo usando o código MarvinSketch™, que posteriormente foi otimizado utilizando o campo de força MMFF94 (Merck Molecular Force Field 94). Os alvos proteicos foram obtidos no repositório Protein Data Bank. Cada simulação de docking molecular gera 20 poses do ligante com relação ao alvo proteico, onde a Best Pose é inicialmente selecionada a partir do Root Mean Square Deviation (RMSD), posteriormente, é utilizada a energia de afinidade (ΔG), para seleção da Best Pose, sendo considerada ideal quando apresenta valores iguais ou inferiores a -6.0 kcal/mol. **Resultados:** O mecanismo de ação do anlodipino contra receptores MRSA foi avaliado in silico por meio de simulações de docking molecular, em que entre os onze complexos receptor-ligante formados, foram destacados dois complexos que apresentaram maiores valores para energia de afinidade, formados entre o anlodipino e os receptores *S. aureus* gyrase complex with DNA e *S. aureus* gyrase. **Conclusão:** O anlodipino exerce atividade antimicrobiana ao inibir uma importante enzima da célula bacteriana.

Palavras-chave: Reposicionamento de fármacos. Resistência bacteriana. Anlodipino. Docagem molecular.