

# DOCKING E DINÂMICA MOLECULAR DE MOLÉCULAS NATURAIS EM UM RECEPTOR DA PROTEÍNA SPIKE DO VÍRUS SARS-COV-2

XV Encontro de Pesquisa e Pós-Graduação

Fernanda Martins de Souza, Helyson Lucas Bezerra Braz, João Junior Faustino Soares, Roberta Jeane Bezerra Jorge, Giberto Santos Cerqueira, Renata de Sousa Alves

Introdução: COVID-19 é uma doença altamente contagiosa causada pelo coronavírus da síndrome respiratória aguda grave 2 (SARS-CoV-2) tornando-se uma grande ameaça em todo o mundo devido à sua rápida natureza de disseminação e variantes mais agressivas, como o caso da Ômicron. A principal estrutura de interação do vírus com a célula hospedeira é a região de pico da proteína Spike chamada de RBD, uma estrutura que teve diversas mutações, dificultando a busca de fármacos. Objetivo: Avaliar o perfil de interações entre moléculas de origem naturais frente a região RBD da proteína Spike (S) do SARS-CoV-2, variante Ômicron. Metodologia: Na primeira etapa ocorreu uma modelagem molecular da estrutura RBD de sequência obtida no Brasil e testes para sua caracterização e validação estrutural. Em seguida, foi realizado o docking molecular entre 6 ligantes fitoquímicos: Curcumina, Carvacrol ( $\pm$ )-Limoneno, Glicirrizina, Alicina e Quercetin-3-Arabinoside na região específica RBD modelada, após obter os melhores resultados os complexos formados foram avaliados por RMSD e RMSF. Resultados: Na homologia da região RBD, obteve-se uma estrutura sem erros estruturais. Nas interações de cada fitoquímico, as moléculas naturais glicirrizina e quercetina apresentaram maior afinidade ligando-se ao sítio ativo encontrado da RBD. A dinâmica molecular confirmou a interação dos ligantes e a estabilidade dos complexos durante as simulações. Conclusão: A quercetina e glicirrizina apresentam um potencial inibitório, ligando-se ao RBD da proteína S, modelado a partir do genoma da variante ômicron do SARS-CoV-2 encontrado no Brasil. O presente trabalho foi realizado com o apoio a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES)

Palavras-chave: COVID-19. MOLÉCULAS NATURAIS.. DOCKING MOLECULAR. DINÂMICA MOLECULAR.