

PROSPECÇÃO IN SILICO DE NUTRACÊUTICOS COM POTENCIAL INIBITÓRIO SOBRE AS PRINCIPAIS SARS-COV-2

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

Em 2019, na cidade de Wuhan na China, foi identificada uma nova patologia causada pelo novo coronavírus SARS-CoV-2. Esta patologia ficou conhecida como COVID-19 e apresenta sintomas relacionados à pneumonia e com quadro de rápida evolução e óbito. Como resposta a esta ameaça surgiram esforços globais em busca de vacinas e de terapias. Neste contexto, dentre os principais alvos terapêuticos do SARS-Cov-2 estão duas proteases responsáveis pela clivagem e ativação da replicação viral: (i) a protease principal (Mpro) a qual possui três domínios estruturais e uma diáde catalítica composta por resíduos de cisteína e histidina; e, (ii) a protease tipo-papaína (PLpro) que apresenta uma tríade catalítica formada pelos resíduos cisteína-histidina-aspartato. Neste projeto utilizaremos a plataforma de ensemble docking DINC-COVID (<http://dinc-covid.kavrakilab.org/>), onde um conjunto conformacional de cada proteína alvo será utilizado durante o ancoramento de metabólitos secundários do Ginkgo biloba, planta de origem asiática. Os compostos a serem testados são duas classes de lactonas: os ginkgolídeos e bilobalídeos, bem como seus derivados. Serão realizadas técnicas de dinâmica molecular estendida junto a cálculo de energia livre de ligação serão empregadas para determinar a estabilidade dos compostos testados e caracterizar o seu perfil de inibição. Os resultados encontrados guiarão o desenho racional de novos agentes terapêuticos inspirados em nutracêuticos (produtos naturais) e motivarão a síntese dos compostos promissores para testes in vitro e in vivo. Agradecimentos: Universidade Federal do Ceará, CAPES.

Palavras-chave: Ginkgo biloba. ensemble docking. SARS-Cov-2. química-farmacêutica.