ESTUDO PRELIMINAR DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL: INIBIÇÃO DA PROTEÍNA SN1 DA DENV-3 PELO CAROTENOIDE BIXINA

Neidelenio Baltazar Soares[1]
Regilany Paulo Colares[2]
Eduardo Menezes Gaeta[3]
Ícaro Bezerra De Freitas[4]
Aluísio Marques Da Fonseca[5]

RESUMO

A dengue (DENV), é uma doença que vêm causando bastante problemas, transmitida pelo mosquito da espécie Aedes aegypti. Na estrutura do vírus encontra-se a glicoproteína SN1, responsável por sua replicação. O presente trabalho tem como objetivo a realização de simulação computacional dos derivados da bixina frente a proteína SN1. O estudo dividiu-se em 4 partes, obtenção da proteína no PDB, obtenção dos ligantes Z,E-bixina no PubChem, Os ligantes E,E-bixina, E,Z-bixina e a norbixina foram construídos no software Chem3D, a otimização das estruturas dos ligantes foi feita pelo software Avogadro, o Docking molecular foi feito usando o Autodock Tools que executa o comando do Autodock Vina. Por meio de simulação computacional o estudo de ancoragem molecular frente a proteína SN1, os ligantes percorreram o espaço tridimensional da grade até encontrar as posições mais favoráveis, ao final do cálculo obteve-se valores de RMSD onde os ligantes acoplaram-se. A EE bixina (-5.8, RMSD 1.864), ZE bixina (-5,6 e RMSD 1.655), EE norbixina (-5,4 e RMSD 2.623), EZ bixina (-5.0 e RMSD 1.591), o docking trabalha na validação da afinidade do ligante presente num determinado sítio ativo encontrado no receptor, a validação do ancoramento nesse estudo deu-se através das energias de afinidade menor que -5,8 Kcal/mol e desvios de RMSD< 2 angstrons (Å). Portanto, levanta-se a hipótese de que os ligantes descritos possuem capacidades inibitórias frente a proteína SN1, assim sendo, mais estudos precisam ser realizados para confirmação da utilização dos ligantes na etapa de planejamento de fármacos.

Palavras-chave: dengue aedes aegypti docking molecular .

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira , Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, neidileniosoares@gmail.com[1]
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Docente, regilany@unilab.edu.br[2]
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, eduardomenezesgaieta@aluno.unilab.edu.br[3]
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, icarobezerraicaro@ymail.com[4]
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Docente, aluisiomf@unilab.edu.br[5]

ISSN: 2447-6161