



PROSPECÇÃO *IN SILICO* DE INIBIDORES DO SARS-COV-2 COM FOCO EM COMPOSTOS MONOTERPENOS NATURAIS

Débora Souza dos Santos¹, Rafael Trindade Maia², Franklin Ferreira de Farias Nóbrega³

RESUMO

A Covid-19, doença viral infecto-contagiosa da família betacoronavírus, responsável por desenvolver sintomas respiratórios variáveis em infectados. Assim, pela declaração de pandemia global, somente, 3 meses após descoberta do primeiro caso na China, dezembro de 2019, faz-se necessário a bioprospecção de alvo terapêutico farmacológico. Assim, para estudo *in silico*, o uso da proteína não estrutural NSP9 relacionada à replicação viral no hospedeiro é promissora como molécula receptora, já como ligante, monoterpenos com ação antiviral conhecida na literatura. Conforme farmacoteca desenvolvida para escolha mais assertiva dos monoterpenos, foi obtido as estruturas a partir de banco de dados online e, uso do *Autodock*, *Discovery Studio* para análise de interação entre os complexos produzidos através do docking aplicando como critério avaliativo: energia de ligação (EL) (Kcal/mol), energia intermolecular (EI) (Kcal/mol), constante de inibição (CI) (μM), ligações de hidrogênio (LH) (receptor – ligante), entre outras. Então, com base nos 4 melhores complexos obtidos a partir de duas moléculas análogas à cânfora, o ácido canfórico I, tem como os 2 resultados: EL= -7,69, EI= -8,28, diferenciando entre estes, tais fatores: CI= -2,32, LH= A:SER6:HN3 – O:O14 e, CI= 2,3, LH= A:SER6:HN3 – O:O13, O14; para os dois complexos do ácido canfórico II: EI= -7,92, EL= -7,32, CI= 4,31, LH= A:SER6:HN3 – O:O13 e, EI= -7,92, EL= -7,33, CI= 4,25, LH= A:SER6:HN3 – O:O13. De acordo com parâmetros de análise, o melhor resultado de complexo é o primeiro, pertencente ao ácido canfórico I, que apresenta alta viabilidade para estudos experimentais anti-SARS-CoV-2.

Palavras-chave: SARS-CoV-2, monoterpeno, bioprospecção de fármacos.

¹Aluna de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, Departamento de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, UFCA, Sumé, PB, e-mail: deborasouza.santos@outlook.com

²Doutor, Professor, Departamento de Educação do Campo, UFCA, Sumé, PB, e-mail: rafael.rafatrin@gmail.com

³Doutor, Professor, Departamento de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, UFCA, Sumé, PB, e-mail: nobrega.franklin13@gmail.com



IN SILICO PROSPECTING OF SARS-COV-2 INHIBITORS WITH FOCUS ON NATURAL MONOTERPENES COMPOUNDS

ABSTRACT

Covid-19, an infectious-contagious viral disease of the betaconoronavirus family, responsible for developing variable respiratory symptoms in infected individuals. Thus, due to the declaration of global pandemic, only 3 months after the discovery of the first case in China, december 2019, it's necessary to bioprospect a viable pharmacological therapeutic. Thus, for in silico study, the use of non-structural protein NSP9 related to viral replication in the host is promising as a receptor molecule, as ligand, monoterpenes with antiviral action known in the literature. According to the pharmacolibrary developed for a more assertive choice of monoterpenes, the structures were obtained from an online database and the use of Autodock, Discovery Studio for analysis of the interaction between the complexes produced through docking, applying as an evaluative criterion: binding energy (EL) (Kcal/mol), intermolecular energy (EI) (Kcal/mol), inhibition constant (CI) (μ M), hydrogen bonds (LH) (receptor – ligand), among others. So, based on the 4 best complexes obtained from two molecules analogous to camphor, camphoric acid I, there're 2 results: EL= -7.69, EI= -8.28, differentiating between these, such factors: CI= -2.32, LH= A:SER6:HN3 - 0:O14 and, CI= 2.3, LH= A:SER6:HN3 - 0:O13, O14; for the two complexes of camphoric acid II: EI = -7.92, EL = -7.32, CI = 4.31, LH = A:SER6:HN3 - 0:O13 and, EI = -7.92, EL = -7.33, CI = 4.25, LH = A:SER6:HN3 - 0:O13. According to analysis parameters, the best complex result is the first one, belonging to camphoric acid I, which has high feasibility for experimental studies against SARS-CoV-2.

Keywords: SARS-CoV-2, monoterpene, drug bioprospecting.