



Nos Olhos
Do Sul
XI SEMANA
UNIVERSITÁRIA

Diversidade,
Inclusão e
Transformação Social

TRIAGEM *IN SILICO* DE DERIVADOS DE FLAVONOIDES COMO POTENCIAIS INIBIDORES DA PROTEÍNA DO HANTAVÍRUS: ESTUDO POR DOCKING E DINÂMICA MOLECULAR.

Eugénio Maurício¹
Domingos Da Costa Chilanda António²
Jorge Armando Jorge³
Herminda Milton⁴
Aluísio Da Fonseca Marques⁵

RESUMO

TRIAGEM *IN SILICO* DE DERIVADOS DE FLAVONOIDES COMO POTENCIAIS INIBIDORES DA PROTEÍNA DO HANTAVÍRUS: ESTUDO POR DOCKING E DINÂMICA MOLECULAR. Eugénio Maurício (IC - Funcap)¹ Jorge Armando Jorge (IC- Funcap /UNILAB)² Herminda Milton (UNILAB)³, Domingos Da Costa Chilanda António (IC- Funcap/UNILAB)⁴ Aluísio Da Fonseca Marques(Orientador)⁵

RESUMO

Introdução: A triagem *in silico* representa uma estratégia computacional essencial para selecionar moléculas com potencial biológico, reduzindo a experimentação animal. O Hantavírus, agente zoonótico associado a graves quadros de síndromes cardiopulmonares e febres hemorrágicas com síndrome renal, possui genoma de RNA cujas funções dependem criticamente da nucleoproteína (N), responsável pela encapsidação e formação de complexos ribonucleoproteicos. Interferir na função dessa proteína constitui um alvo promissor para o desenvolvimento de antivirais. Nesse contexto, a química medicinal computacional viabiliza a investigação segura de interações entre flavonoides e alvos virais de interesse. **Objetivos:** Este trabalho tem como objetivo realizar a triagem *in silico* de derivados de flavonoides como candidatos a inibidores da nucleoproteína do Hantavírus. **Metodologia:** A metodologia abrange a seleção e preparação dos compostos, seguida por estudos de Docking molecular para estimar a afinidade de interação e mapear os resíduos chave no complexo proteína-ligante. Os compostos mais promissores serão submetidos a análises farmacocinéticas, farmacodinâmicas e toxicológicas computacionais, além de simulações de dinâmica molecular para avaliar a estabilidade estrutural ao longo do tempo. **Resultados:** Espera-se identificar moléculas com padrões favoráveis de interação e alta estabilidade complexa. **Apoio Financeiro:** Funcap Grande área do CNPq: Ciências Exatas e Naturais, Ciências de Saúde e Ciências Biológicas. O desenvolvido na UNILAB, o projeto fomenta a diversidade, a inclusão e a transformação social, descentralizando a ciência de ponta no Sul Global e fortalecendo pesquisas em contextos plurais. Adicionalmente, o uso de métodos computacionais promove a sustentabilidade ética pela redução de testes em animais, atuando em prol da saúde pública e de populações vulneráveis afetadas por zoonoses. O suporte da FUNCAP tem sido fundamental para o desenvolvimento destas atividades, impulsionando avanços significativos na formação acadêmica e na qualidade dos resultados científicos obtidos.

Palavras-chave: Hantavírus; Docking Molecular; Triagem *in Silico*; Flavonoides.

Palavras-chave: Hantavírus; Docking Molecular; Triagem *in Silico*; Flavonoides.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, mauricioeugenio167@gmail.com¹

Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, silanda@aluno.unilab.edu.br²

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, jorgejorge@aluno.unilab.edu.br³

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, hermindamilton9@gmail.com⁴

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Docente, aluisiomf@unilab.edu.br⁵