

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

Neidelenio Baltazar Soares¹

Regilany Paulo Colares²

Eduardo Menezes Gaeta³

Ícaro Bezerra De Freitas⁴

Aluísio Marques Da Fonseca⁵

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

Palavras-chave: dengue aedes aegypti docking molecular .

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, neidilenioa@unilab.edu.br¹

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Docente, regilany@unilab.edu.br²

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

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, icarobezerraicar@unilab.edu.br⁴

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

