



XXXV SALÃO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

6 a 10 de novembro

Evento	Salão UFRGS 2023: SIC - XXXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2023
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Docking molecular em RdRps com análogos do Molnupiravir
Autor	PEDRO ANTÔNIO BASTIANI PAGANELLI
Orientador	PAULO AUGUSTO NETZ

No Brasil, a pandemia gerada pelo vírus SARS-CoV-2 conduziu a um pouco mais de 700.000 óbitos e 37.500.000 casos confirmados. Além disso, a doença potencialmente deixa sequelas bastante graves e notáveis. Com uma taxa de incidência de 1,9% no nosso país, as buscas por tratamentos contra a doença ainda devem ser mantidas em progresso. Travar ou dificultar que os mecanismos de replicação do vírus ajam de forma ideal implica na inviabilidade reprodutiva do indivíduo e na sua conseqüente morte. A RNA-dependente RNA-polimerase (RdRp) é um componente do aparato replicativo da maioria dos vírus de RNA, incluindo o SARS-CoV-2, o vírus da hepatite C, o rotavírus e o vírus da dengue. Avaliar o papel de fármacos na inibição do pleno funcionamento da RdRp dos vírus supracitados pode representar um efetivo tratamento para as doenças que eles causam. O molnupiravir é uma molécula medicamentosa que pode alterar entre seus dois tautômeros, causando mutações no genoma dos organismos. Em 04/05/2022, o uso emergencial do molnupiravir foi liberado pela ANVISA. Levando tudo isso em conta, as atividades desenvolvidas no projeto pretendiam avaliar o papel de análogos do molnupiravir nas RdRps de quatro diferentes vírus, qualificando e quantificando as interações entre fármaco e molécula-alvo. Os softwares de simulação de modelagem molecular AutoDockTools (ADT) e DINC-COVID Web Server foram utilizados para as dinâmicas, bem como os arquivos de PDBs das moléculas. Comparando os resultados e valores em uma tabela, foi possível identificar o NHC como tendo interações mais relevantes quando interagindo com as RdRps do coronavírus e da dengue. Já para os homólogos em hepatite C e rotavírus, assim como para a Main Protease do coronavírus, o análogo mais relevante parece ser o MMP. Também foi realizada a caracterização qualitativa das interações, ou seja, anotar quais resíduos de peptídeos estabeleciam ligação com o fármaco em questão.