



Evento	Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2022
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Docking e simulação das interações entre proteínas relevantes do Coronavírus e seu receptor humano
Autor	EDUARDO RAMIRES KUHN
Orientador	PAULO AUGUSTO NETZ

Docking e simulação das interações entre proteínas relevantes do Coronavírus e seu receptor humano.

Autor: Eduardo Ramires Kuhn

Orientador: Prof. Dr. Paulo Augusto Netz

Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

O Coronavírus SARS-CoV-2 se tornou a maior preocupação da saúde pública, sendo o agente que provoca a pandemia CoViD-19. A transmissão desse vírus para o organismo humano ocorre através de uma interação inicial com a enzima ACE2 (Enzima Conversora da Angiotensina 2) com SARS-CoV-2, onde se envolvem as proteínas Spike (proteína S do vírus), suas mutantes (como a E484K), TMPRSS2 e as Catepsinas L e B (CatL e B) sendo essas possíveis alvos para a inibição visando frear o contágio. Os flavonoides constituem um grande grupo de metabólitos secundários tendo uma ampla gama de propriedades biológicas/farmacológicas, dentre eles a pelargonidina (PEL) e a peonidina (PEO) foram selecionados como ligantes promissores para investigar sua potencial inibição destas proteínas. O objetivo do projeto é, através de métodos computacionais, Docagem Molecular e Dinâmica Molecular, estudar estes sistemas Proteína-Ligante. A metodologia baseia-se em primeiramente através da docagem molecular determinar o melhor complexo obtido, a partir desse gerar a topologia (AMBER03), seguido de minimizações e simulações preparatórias para, depois, realizar as dinâmicas de 200 ns para cada sistema e por fim calcular as energias de ligação ao longo da simulação. As análises (RMSD, ligações de hidrogênio, distância mínima entre proteína e ligante e entre seus centros de massa, energia de ligação e avaliação visual da trajetória) nos permitem concluir que há uma tendência de interação mais favorável com as Catepsinas B e L, enquanto que com as proteínas Spike, E484K e TMPRSS2 há uma tendência migratória das posições iniciais.