

ESTUDOS *IN SILICO* PARA BUSCAS DE POTENCIAIS FÁRMACOS CONTRA O SARS-COV-2 (COVID-19)

Felipe Souza Pinheiro¹, Bruno Silva Andrade²

1. Discente do Curso de Farmácia da UESB/BA
2. Professor do Departamento de Ciências Biológicas da UESB/BA

A pandemia da COVID-19, causada pelo SARS-CoV-2, gerou uma crise global, impulsionando a busca por tratamentos eficazes. A Catepsina-L foi identificada como um facilitador da entrada viral nas células humanas, tornando-se um alvo para inibidores terapêuticos. O presente estudo consistiu em utilizar técnicas de *docking* molecular e dinâmica molecular para avaliar a interação entre a Catepsina-L e 51 inibidores potenciais, com o intuito de identificar o mais promissor. O composto “Nitrile_group_containing_inhibitor” apresentou-se como o inibidor mais eficaz, com energia de ligação de -8,13 kcal/mol e eficiência do ligante de -1168,73 J/mol. A dinâmica molecular de 100 ns demonstrou estabilidade do complexo proteína-ligante, conforme revelado pelo gráfico de RMSD que estabilizou após 10.000 ps. O RMSF identificou regiões mais móveis da proteína entre os resíduos 100-150, enquanto o raio de giração se manteve constante em 1,7 nm, indicando integridade estrutural. Além disso, o aumento das ligações de hidrogênio após 80.000 ps reforçou a estabilidade do complexo. Esses resultados apontam que o inibidor "Nitrile_group_containing_inhibitor" atuou como um candidato promissor para o desenvolvimento de terapias contra a COVID-19, justificando estudos futuros mais aprofundados para avaliar seu potencial terapêutico.

Palavras-chaves: COVID-19, Catepsina-L, inibidores

1. CAMPOS, Mônica Rodrigues et al., **Cargas de Doença da COVID-19 e de suas complicações e mensuração (DALY) e perspectivas no Sistema Único de Saúde**. Revista Brasileira de Epidemiologia, [S.L.], V. 23, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1590/0102-311X00148920>. Acesso em: 22 jan. 2024.
2. DANA, D.; Pathak, SK. **Uma revisão de inibidores de pequenas moléculas e sondas funcionais da catepsina L humana**. Molecules 2020, 25, 698. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules25030698>. Acesso em: 20 mar. 2024.
3. FUJISHIMA, Akira et al. **A estrutura cristalina da Catepsina L humana complexada com E-64**. FEBS Letters, 407, 1997. DOI: 10.1016/S0014-5793(97)00216-0. Acesso em: 23 jan. 2024.