

VIII SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA

XXVI Semana de Iniciação Científica da URCA

04 a 09 de dezembro de 2023

Tema: "INTERIORIZAÇÃO DA CIÊNCIA E REDUÇÃO DE ASSIMETRIAS: O PAPEL DOS PIBIC'S COMO EXPERIÊNCIA DE ARTICULAÇÃO DA PESQUISA NA GRADUAÇÃO E NA PÓS GRADUAÇÃO"



SCREENING IN SILICO E DINÂMICA MOLECULAR DE CHALCONAS COM POTENCIAL ATIVIDADE INIBITÓRIA DE BOMBAS DE EFLUXO

Icaro Marcus da Silva Pequeno¹, Carlos Emídio Sampaio Nogueira²

Resumo: Uma das maiores ameaças à saúde mundial é o crescente número das chamadas superbactérias, bactérias resistentes aos fármacos conhecidos, consequência do uso indiscriminado de antibióticos nas últimas décadas. Esta ameaça impulsionou não somente a busca por novos medicamentos, mas principalmente, a busca por metodologias diferentes para o descobrimento ou criação destes. Um método promissor para o auxílio no descobrimento de novas substâncias com atividade biológica é o *screening in silico*. O alvo de nosso *screening* são proteínas bacterianas capazes de expulsar antibióticos, chamadas de bombas de efluxo. As bombas de efluxo são proteínas capazes de expulsar diversos compostos, em particular antibióticos. Encontrar compostos capazes de inibir essas bombas é de extrema importância, visto que sua inibição reverte a resistência bacteriana aos antibióticos. No presente trabalho após selecionadas 1135 chalconas disponíveis no PubChem, foi realizado o *docking* molecular (consiste em utilizar métodos de mecânica molecular para obter uma boa aproximação da conformação e orientação esperadas dos ligantes no sítio de ligação da proteína). A partir daí, com base em análises feitas nas energias de afinidades das moléculas, aquelas poses que apresentavam a melhor energia e que apresentavam as ligações mais importantes, foram escolhidas para realização da dinâmica molecular. A segunda etapa nessa triagem denominada como dinâmica molecular, consiste no método de simulação computacional para analisar os movimentos físicos de átomos e moléculas. Os átomos das moléculas das proteínas alvos e ligantes interagem por um período de tempo, dando uma visão da evolução dinâmica do sistema. A dinâmica molecular pode, então, mostrar se existe diferença de comportamento entre as substâncias testadas e aquelas que sabidamente inibem as bombas de efluxo. Este estudo busca identificar quais chalconas potencialmente possuem capacidade inibitória de bombas de efluxo. A rápida averiguação do potencial de inibição através de métodos computacionais direcionaria o foco de estudos laboratoriais para os compostos com maior viabilidade.

Palavras-chave: Superbactérias. *Screening*. Bomba de efluxo. *Docking*.

Agradecimentos: O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES).

¹ Universidade Regional do Cariri, email: icaro.marcus@urca.br

² Universidade Regional do Cariri, email: carlos.nogueira@urca.br