

**ESTUDO DE AFINIDADE MOLECULAR DE METABÓLITOS SECUNDÁRIOS DE
DIPTERYX ODORATA INIBIDORES DAS PROTEÍNAS DE ENTRADA CELULAR SPIKE
(S) E MPRO DO NOVO CORONAVÍRUS SARS-COV-2**

HELLEN CRIS ARAÚJO SOUZA; JEFFERSON ALMEIDA ROCHA

Introdução: Um novo coronavírus (CoV) foi determinado em dezembro de 2019 como responsável por um surto de pneumonia atípica potencialmente fatal, definida como doença do coronavírus-19 (COVID-19), cuja a causa é a síndrome respiratória aguda grave do coronavírus 2 (SARS-CoV-2). Até o momento ainda não existe nenhum tratamento realmente eficaz contra a COVID-19 e os produtos naturais tem surgido como alternativa em muitos estudos. **Objetivo:** Tendo por objetivo avaliar por métodos in silico os metabólitos secundários de *Dipteryx odorata* como inibidor da proteína Spike (S) e mPro do novo coronavírus Sars-Cov-2. **Material e métodos:** A metodologia utilizada foi por docagem molecular começando pela seleção dos constituintes químicos da *D. odorata* adquiridas na base de dados Pubchem e a retirada das proteínas do SARS-COV-2 (6vxx, 6lu7, 1R42n, Receptor5) do banco de dados do Protein Data Bank (PDB). A geometria do complexo foi calculada usando o programa Gaussian 09, As docagens foram realizadas utilizando o programa Autodock Tools 1.5.6, e o Autodock Vina na obtenção do cálculo, após tendo juntado a proteína com o ligante considerado de menor energia um resultado bom, foi usado o LigPlus na obtenção dos aminoácidos, e o chimera na estrutura em 3D. **Resultados:** Foram realizadas 128 docagens, testando 32 ligantes nas quatro proteínas do coronavírus, sendo que obteve 17 resultados das docagens com energias de ligação boas, menores que -8.0 Kcal/mol, sendo que o melhor resultado parcialmente obtido nos cálculos foi o diterpeno ácido vouacapenico, com uma energia de ligação -9.9 Kcal/mol. **Conclusão:** Em vista do emprego da espécie na medicina popular, devido a presença da cumarina princípio ativo, que é a droga extraída das sementes, a *D. odorata* é considerada uma planta que possui um potencial farmacológico de relevância que pode ser utilizado no tratamento de diversas doenças.

Palavras-chave: Coronavírus-19, *Dipteryx odorata*, Proteínas.