

TÍTULO: POTENCIAL ANTIBIOFÍLMICO DA LUPENONA *IN SILICO*

AUTORES: GASPAR, L.M.A.C.; SANTOS-NETO, A.G.; ARAÚJO, E.S.; ROCHA, F.S.; SANTOS, T.B.; GOMES, D.S.; BEZERRA, A.L.P.S.; SANTOS, A.F.; ALMEIDA, L.F.; DROPPA-ALMEIDA, D.

INSTITUIÇÃO: UNIVERSIDADE TIRADENTES, ARACAJU SE (AVENIDA MURILO DANTAS, 300, FAROLANDIA, ARACAJU – SE, CEP 49032-490, BRASIL)

RESUMO:

Introdução: As infecções bacterianas estão cada vez mais difíceis de serem combatidas, os que as tornam uma ameaça à saúde pública em nível global, por decorrência da ineficácia dos tratamentos atuais, assim como o alto custo e o aumento do tempo de internação. O aumento do agrave dessas infecções tem sido devido à resistência bacteriana, incluindo a produção de biofilmes bacterianos. O *LasR* está no topo da cascata regulatória de detecção de *quorum sensing*, um sistema de comunicação entre células bacterianas, incluindo a bactéria *Pseudomonas aeruginosa*, que consequentemente estimula a produção de biofilmes. A partir disso, foi investigado um potencial composto antibacteriano do gênero *Sterculia*, a lupenona considerado um triterpenóide, muito utilizado na indústria farmacêutica. Diante disso, predições *in silico* com o uso da bioinformática fornecem informações importantes sobre os compostos de maneira geral auxiliando deste modo no desenho de novos fármacos para inibição de fatores de virulência do patógeno. **Objetivo:** Diante disso, o objetivo desse trabalho foi analisar, *in silico*, o potencial antibiofílmico da lupenona. **Metodologia:** Para a realização dos estudos *in silico*, a estrutura 3D da lupenona foi obtida no PubChem (92158), enquanto o *LasR* (4NG2) foi obtido no Protein Data Bank (PDB). Após a obtenção da lupenona e o *LasR* ambos foram preparados e o docking molecular foi realizado com auxílio do AutoDock Vina. As análises do docking molecular foi realizada no Discovery Studio. **Resultados:** O AutoDock Vina apresentou nove possíveis interações entre a lupenona e o *LasR*, apresentando uma energia de ligação entre -8.9 a -10.8 Kcal/mol. Diante das análises foi possível verificar interações intermoleculares do tipo de ligações de hidrogênio e hidrofóbicas, e segundo a literatura são interações importantes para garantir que o composto em avaliação tenha capacidade em inibir de fato o alvo molecular. Essas análises *in silico* demonstrou que a lupenona tem um importante efeito inibidor no alvo molecular *LasR*, o qual é um importante regulador de *quorum-sensing*, sendo muito utilizado no desenho de fármacos com potencial antibiofílmico. **Conclusão:** Portanto, pode-se concluir que a lupenona, um triterpeno presente no gênero da *Sterculia* e em outras plantas de importância medicinal, tem um potencial em inibir a produção de biofilme *in silico*, tornando-se um composto importante para ensaios *in vitro* como potencial antimicrobiano e antibiofílmico.

Palavras-chave: Ação Antimicrobiana, Infecções Bacterianas, Terpenoides.