

PESQUISA DE CAMPO - CIÊNCIAS DA SAÚDE

**ANÁLISE IN SILICO DE POTENCIAIS INIBIDORES NATURAIS DA
INTERAÇÃO PVDBP-RII/DARC NA INFECÇÃO PELO PLASMODIUM VIVAX
A PARTIR DE COMPOSTOS DO DATABASE NPASS**

João Carlos Kischener (kischenerjc@gmail.com)

*Angela Marcia Selhorst E Silva Beserra
(360102441@prof.sempreunifacimed.com.br)*

A malária vivax permanece como uma das doenças parasitárias mais prevalentes no Brasil, em especial no estado de Rondônia, sendo a interação entre o receptor de quimiocinas Duffy (DARC) e a segunda região da proteína de ligação do Plasmodium vivax (PvDBP-RII) uma etapa fundamental para a invasão dos eritrócitos. O presente estudo teve como objetivo identificar compostos naturais com potencial inibitório dessa interação por meio de triagem virtual. Para isso, foram inicialmente avaliados 9.937 compostos do banco de dados NPASS, dos quais 649 foram selecionados para análises e simulação de docking molecular. A triagem resultou na identificação de 22 candidatos com afinidade de ligação relevante, sendo cinco compostos de destaque: Anigopreissin A ($\Delta G = -8,3$ kcal/mol), isolado de Anigozanthos preissii e Macropidia fuliginosa; Dihydroisoplagiochin A ($\Delta G = -9,7$ kcal/mol), encontrado em Plagiochila fruticosa; NPC47883 ($\Delta G = -8,4$ kcal/mol), derivado do ácido vanílico presente em Cladophora socialis; Cinchonain I B ($\Delta G = -8,1$ kcal/mol), isolado de Iryanthera megistophylla, Eriobotrya e Trichilia catigua; e (-)-Hydnocarpin ($\Delta G = -8,2$ kcal/mol), descrito em Hydnocarpus wightiana e também encontrado em Epimedium sagittatum. Esses compostos

demonstraram ligações de hidrogênio, interações hidrofóbicas e contatos de van der Waals com resíduos-chave envolvidos na comunicação PvDBP-RII/DARC, sugerindo forte potencial para impedir essa interação e bloquear a invasão eritrocitária pelo parasito. Em conjunto, os achados indicam cinco candidatos naturais promissores para o desenvolvimento de novas estratégias terapêuticas contra a malária vivax, fornecendo subsídios iniciais para futuros estudos de validação em dinâmica molecular, bem como em ensaios in vitro e in vivo.

Palavras-chave: plasmodium vivax; pvdbp-rii/darc; docking molecular; npass.