

# INTERAÇÃO MOLECULAR DO GO COM HEPARINA EM GLICOPROTEÍNAS DO VÍRUS HERPES SIMPLES 1 E PERFIL DE SEGURANÇA EM CÉLULAS VERO

SCHORN, ISADORA DE SOUZA LIBERALI<sup>1</sup>; SANTOS, Mylane Genro<sup>1</sup>;  
DORNELLES, Klynsmann Gambini<sup>1</sup>; ROCKEMBACH, Ana Clara Laval<sup>1</sup>;  
MONTEIRO, Francielle Liz<sup>1</sup>;

**Fundamentação/Introdução:** As infecções pelo Vírus Herpes Simples 1 (HSV-1) configuram um relevante problema de saúde pública em virtude da sua alta prevalência, transmissibilidade e limitada eficácia dos antivirais convencionais na fase de latência viral, o que favorece recorrências clínicas. Nesse cenário, o desenvolvimento de nanofármacos surge como uma estratégia promissora para novas abordagens terapêuticas.

**Objetivos:** Avaliar o perfil de segurança do óxido de grafeno com heparina (GO@Heparina) e investigar, mediante análises computacionais baseadas em docking molecular, sua interação com proteínas envolvidas na adsorção do HSV-1.

**Delineamento/Métodos:** Foram realizados estudos in silico por docking molecular no AutoDock Vina, com determinação da energia de afinidade e do RMSD (Root Mean Square Deviation) como indicadores da estabilidade das interações. Paralelamente, células VERO foram expostas ao GO@Heparina (2,5% e 5%) nas concentrações de 3,9–250 µg/mL por 24 e 72 horas, para avaliação da citotoxicidade (ensaio de MTT) e estresse oxidativo (produção de espécies reativas de oxigênio e nitritos).

**Resultados:** Os estudos de docking molecular indicaram interação estável entre o GO@Heparina e os alvos virais, evidenciada por valores favoráveis de energia de afinidade e baixos valores de RMSD, sugerindo estabilidade conformacional dos complexos formados. Esses resultados reforçam o potencial do nanocomposto ao interagir com as glicoproteínas virais gB e gC, responsáveis pelo reconhecimento e ligação ao proteoglicano sulfato de heparan na superfície celular durante a etapa inicial de adsorção do HSV-1. Nos ensaios in vitro, o GO@Heparina 2,5% apresentou viabilidade celular até a concentração de 62,5 µg/mL, com redução significativa de espécies reativas de oxigênio e nitritos, enquanto efeitos citotóxicos foram observados apenas em concentrações mais elevadas ( $\geq 125$  µg/mL), associados ao aumento do estresse oxidativo. No GO@Heparina 5,0%, as células VERO apresentaram viabilidade em até 125 µg/mL, exibindo efeito citotóxico na concentração de 250 µg/mL.

**Conclusões/Considerações Finais:** O GO@Heparina apresentou interação molecular favorável em estudos computacionais, associada à sua segurança em concentrações de até 62,5 µg/mL. A formulação contendo 5% de heparina destacou-se como a mais biocompatível, configurando-se como potencial candidato terapêutico para investigações antivirais frente ao HSV-1.

**Palavras-chave:** Antiviral; Biocompatibilidade; Palavras chave: Citotoxicidade;

<sup>1</sup> Universidade Franciscana - Santa Maria - RS - Brasil