

Título: Abordagem computacional para inibição do gene *mcr-1* usando um composto natural como estratégia antimicrobiana

Palavras-chave:

Docking Molecular

Multirresistência

Colistina

Introdução: As Infecções Relacionadas à Assistência à Saúde (IRAS) ocorrem durante atendimento médico, sendo mais graves em ambientes hospitalares devido à imunidade comprometida dos pacientes. A prevenção é possível através de medidas discutidas pela Comissão de Controle de Infecção Hospitalar (CCIH). O uso excessivo de antibióticos pela população levou à resistência microbiana. Colistina, ou Polimixina E, é um antibiótico usado na pecuária contra *Escherichia coli*, mas sua toxicidade levou ao abandono, sendo resgatada como último recurso contra bactérias resistentes. O gene plasmidial *mcr-1*, descoberto na China, confere resistência à colistina. A *Aloe emodin*, presente em plantas como a babosa, exibe propriedades antibacterianas e cicatrizantes. O docking molecular é uma técnica que insere estruturas químicas em proteínas-alvo, verificando a eficiência da ligação ligante-proteína. Objetivo: Identificar a capacidade de inibição do gene *mcr-1* com *A. emodin*. Métodos: O alvo escolhido para os testes de docking molecular foi o domínio catalítico da proteína MCR-1 de *Escherichia coli* (Código PDB: 5GOV) e o ligante *A. emodin* (código 10207) foi obtido do PubChem. O software AutoDock Vina avaliou a afinidade entre proteína e ligante, enquanto o Discovery Studio 2021 visualizou a interação com resíduos proteicos. Resultado: Foi revelado afinidade de ligação de -6,29 kcal/mol e eficácia de interação de -0,31. O *A. emodin* mostrou alta afinidade e interação com o resíduo THR 107, o sítio ativo da proteína. O resultado alinha-se com Jaing e colaboradores onde foi comprovado a eficiência do *A. emodin* inibir a capacidade da α -toxina formar poros do *Staphylococcus aureus*. Trindade e colaboradores (2023) testaram a capacidade antibacteriana de diversos compostos naturais, onde o *A. emodin* teve o melhor resultado, corroborando com esse estudo. Conclusão: A abordagem da resistência bacteriana de amplo espectro representa um desafio substancial no âmbito da saúde pública contemporânea. Em paralelo a experimentações *in vitro*, simulações computacionais constituem uma ferramenta complementar valiosa, fomentando a apreensão mais abrangente das interações enzimáticas subjacentes. A imperatividade de investigações de cunho aprofundado em relação a fitoterápicos como viáveis alternativas se apresenta como um requisito premente.