

## Título: Potencial Terapêutico de Fitoterápicos: Análise de Docking Molecular para Enfrentar Bactérias Multirresistentes

Palavras-chave:

Colistina

Orégano

Docking molecular

Introdução: As Infecções Relacionadas à Assistência à Saúde (IRAS) são infecções adquiridas após intervenções de saúde, causando elevado impacto econômico. Fatores de disseminação incluem higienização inadequada das mãos e uso incorreto de antibióticos. Colistina ou polimixina E é um antibiótico que atua a nível de membranas celular, desequilibrando íons presentes, levando à ruptura da membrana e morte bacteriana. Devido à toxicidade, deixou de ser usado, mas após o surgimento de bactérias resistentes, a colistina virou último recurso. Em 2015, cientistas chineses descobriram o gene plasmidial *mcr-1*, que confere resistência à colistina. O orégano é conhecido majoritariamente por seu uso culinário, mas possui propriedades antimicrobianas. A simulação de docking molecular permite que os cientistas investiguem como diferentes moléculas se ligam às proteínas e como suas estruturas tridimensionais interagem. Objetivo: Verificar a capacidade de inibição *in silico* do gene *mcr-1* com os compostos carvacrol e timol. Métodos: O alvo escolhido para os testes de docking molecular foi o domínio catalítico da proteína MCR-1 de *E. coli* (Código PDB: 5GOV) e os ligantes carvacrol (ID 10364) e timol (ID 65565) foram obtidos 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 -7,25 kcal/mol e eficácia de interação de -0,22 do timol, já o carvacrol teve afinidade de ligação de -6,06 kcal/mol e eficiência de ligação -0,55. Os dois compostos obtiveram alta afinidade e interação com o resíduo THR 107, o sítio ativo da proteína. O resultado alinha-se com Lagha e colaboradores (2019) que testaram diversos óleos essenciais e suas atividades antimicrobianas, onde o óleo de orégano teve um dos maiores desempenhos antibacterianos. Trindade e colaboradores (2023) testaram a capacidade antibacteriana de diversos compostos naturais, onde a curcumina teve a melhor interação com o resíduo THR 107. Conclusão: Enfrentar microrganismos bacterianos de alta resistência constitui um desafio significativo no âmbito da saúde pública. A utilização de simulações computacionais desempenha um papel crucial para complementar os estudos *in vitro*. A contínua exploração da propriedade antimicrobiana do orégano pode resultar no desenvolvimento de tratamentos alternativos contra microrganismos resistentes a antimicrobianos.