

Reposicionamento *in silico* de fármacos aprovados com potencial contra o metabolismo energético do *Schistosoma mansoni*

Nicole M. Calixto¹; Lourival A. Silva²

IF Goiano - Câmpus Ceres, Caixa Postal 51, 76.300-000 Ceres, GO, Brasil. Email: nicollemelocalixto@hotmail.com. ¹Bolsista PIBIC/IF Goiano: Nicole Melo Calixto, 76.300-000, Ceres, GO Brasil. Programa Institucional de Iniciação Científica. ²Orientador PIBIC/IF Goiano: Dr. Lourival de Almeida Silva. Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano – Campus Ceres 76.300-000, Ceres, GO, Brasil

A esquistossomose é uma doença parasitária negligenciada causada pelo *Schistosoma* spp. O tratamento antiesquistossomose utiliza praziquantel, embora seja eficaz o risco de resistência ao fármaco é o principal problema da terapia. Diante disso, é urgente a necessidade desenvolver novos fármacos antiesquistossomose. Entretanto, o desenvolvimento de novos fármacos é considerado de alto custo e lento. Por esta razão tem sido proposta a estratégia de reposicionamento de fármacos aprovados, que consiste em usar um fármaco já aprovado para uma doença para tratar outra. No presente trabalho foram usadas ferramentas de bioinformática para obter e analisar informações genômicas e farmacológicas disponíveis em bases de dados de acesso livre na internet sobre o parasito de interesse. O foco principal foi buscar, identificar e analisar alvos protéicos do metabolismo energético do *Schistosoma mansoni*, visando o reposicionamento *in silico* de fármacos aprovados para esquistossomose. As bases de dados usadas foram *TDR Targets Database* (TTD), *Gene DB*, *Protein*, *Drug Bank* (DB) e *Therapeutic Targets Database* (TT). A base TTD forneceu a identidade de 62 alvos atuantes no metabolismo energético do *S. mansoni*. Nas bases de dados *Gene DB* e *Protein* foram obtidos peptídeos correspondentes de cada um desses alvos. Em seguida as sequências peptídicas foram introduzidas no campo de busca nas bases de dados DB e TT, para pesquisar inibidores baseado na similaridade do alvo. A partir dos resultados obtidos foi gerada uma lista *in silico* com os alvos do metabolismo energético do *S. mansoni* e seus inibidores. Para 62 alvos identificados na TTD foram obtidos 20 resultados positivos. Para esses alvos foram identificados 42 fármacos aprovados, sendo 36 na DB e 06 na TT. Através da identificação dessas dezenas de fármacos aprovados sugere-se que sejam avaliados em testes *in vitro* e *in vivo* visando confirmar sua eficácia e, posteriormente, reposicioná-los na terapia antiesquistossomose.

Palavras-chave: Esquistossomose, bioinformática, descoberta de fármacos.

Apoio: Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano (IF Goiano) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).