



Universidade Federal do Amazonas  
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação  
Departamento de Apoio à Pesquisa  
Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica

TÍTULO  
(CÓDIGO DO PROJETO)

ESTUDANTE:

Manaus - AM  
2021

ESTUDANTE

## TÍTULO

Relatório final de pesquisa PIB-E/  
pertencente ao campo de Ciências Exatas  
e da Terra, como prestação de contas ao  
Programa de Bolsas de Iniciação Científica  
(PIBIC) na edição 2020-2021.

Área de concentração:

Opção:

**Orientador:**

**Colaborador:**

Manaus - AM  
2021

# Dedicatória

*Dedicado a todos acometidos pela COVID-19 e que já não mais conseguem ver uma luz ao fim. Também dedicamos a todos os pesquisadores e pessoas que se uniram para ajudar uns aos outros na luta contra o vírus SARS-CoV-2.*

# Resumo

*SOBRENOME, ALUNO. Título. 2021. 26 p. Iniciação Científica - Laboratório, Universidade Federal do Amazonas, Manaus, 2021.*

O novo  $\beta$ -coronavírus causou tristes perdas em todo o mundo e o surgimento de novas variantes tem causado grande preocupação.

**Palavras-chave:** SARS-CoV-2.

# Agradecimentos

- Agradeço muito a Deus, por me dar forças e esperança em meio às adversidades.
- Expressar os agradecimento a todos que ajudaram de algum modo, visto que é impossível alguém trabalhar sozinho.
- Caso tenha havido o apoio financeiro é obrigatório expressar os agradecimento à agência de fomento.

# Conteúdo

|     |                                                                                  |    |
|-----|----------------------------------------------------------------------------------|----|
| I   | IMPACTOS TEÓRICOS DA LINHAGEM P.1 E P.2                                          | 1  |
| 1   | REVISÃO BIBLIOGRÁFICA                                                            | 2  |
| 2   | OBJETIVOS                                                                        | 3  |
| 2.1 | Objetivos específicos . . . . .                                                  | 3  |
| 3   | FUNDAMENTOS TEÓRICOS                                                             | 4  |
| 3.1 | Teoria da Dinâmica molecular . . . . .                                           | 4  |
| 4   | METODOLOGIA                                                                      | 5  |
| 4.1 | Metodologias computacionais . . . . .                                            | 5  |
| 5   | RESULTADOS E DISCUSSÕES                                                          | 6  |
| 5.1 | Cristalografia do DNA . . . . .                                                  | 6  |
| 6   | CONSIDERAÇÕES FINAIS                                                             | 7  |
| 7   | PERSPECTIVAS FUTURAS                                                             | 8  |
| II  | APÊNDICE                                                                         | 9  |
| A   | TEORIA DO DOCKING MOLECULAR                                                      | 10 |
| A.1 | Entropia e energia livre: A base teórica das interações biomoleculares . . . . . | 10 |
|     | BIBLIOGRAFIA                                                                     | 11 |

# Lista de Figuras

|          |                                                                                            |   |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------|---|
| Figura 1 | Cristalografia da molécula de DNA obtida pela biofísica Rosalind Franklin em 1952. . . . . | 6 |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------|---|

# Lista de Tabelas

|          |                                                          |   |
|----------|----------------------------------------------------------|---|
| Tabela 1 | Distâncias interatômicas para a molécula de DNA. . . . . | 6 |
|----------|----------------------------------------------------------|---|



## Lista de abreviações e siglas

|      |                                                                                  |
|------|----------------------------------------------------------------------------------|
| ACE2 | Enzima conversora da angiotensina 2, do inglês “Angiotensin-converting enzyme 2” |
| PDB  | Banco de Dados de Proteínas, do inglês “Protein Data Bank”                       |

# Lista de constantes físico-químicas

$c$        $299.792.458m \cdot s^{-1}$

## Parte I

### IMPACTOS TEÓRICOS DA LINHAGEM P.1 E P.2

Inicialmente foi realizado uma revisão bibliográfica sobre a etiologia, epidemiologia, aspectos clínicos e finalmente o processo de evolução viral do SARS-CoV-2.

# 1 Revisão bibliográfica

Os primeiros casos de hospitalização por infecções de SARS-CoV-2 foram relatados em dezembro de 2019, em Wuhan, província de Hubei, China. Este vírus é de uma proporção não vista desde a pandemia da Gripe Espanhola de 1918 [1]. Até 12 de março de 2021, mais de 119 milhões de casos foram confirmados e notificados com cerca de 2,6 milhões de mortes dentre 188 países [2].

## 2 Objetivos

Entender as causas teóricas.

### 2.1 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Estudar via simulações de dinâmica molecular atomística;

## 3 Fundamentos teóricos

### 3.1 TEORIA DA DINÂMICA MOLECULAR

Devemos ressaltar que a existência da dinâmica molecular deve-se muito ao físico Richard P. Feynman, tendo dito a célebre frase: "Se fôssemos citar a hipótese mais poderosa de todas, a qual nos leva a uma tentativa de entender a vida, é que todas as coisas são feitas de átomos e podem ser entendidas em termos da dança e do balanço dos átomos".

$$F_i = - \left( \frac{\partial V_{total}}{\partial r_i} \right) \quad (1)$$

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = - \frac{\partial V}{\partial r} - m\beta \frac{dr}{dt} + R(t) \quad (2)$$

## 4 Metodologia

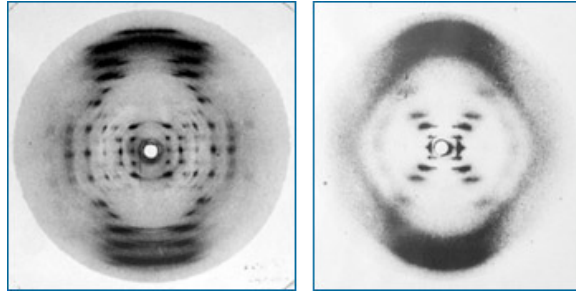
### 4.1 METODOLOGIAS COMPUTACIONAIS

Nesta etapa foram realizados simulações atomísticas (all-atom) de dinâmica molecular em  $18ns$  para o complexo ACE2-RBD (PDB ID: 6M0J)

## 5 Resultados e discussões

### 5.1 CRISTALOGRAFIA DO DNA

Na [Figura 1](#) é apresentado uma das principais descobertas na ciência. Enquanto isso na [Tabela 1](#) encontram-se as distâncias interatômicas.



**Figura 1:** *Cristalografia da molécula de DNA obtida pela biofísica Rosalind Franklin em 1952.*

**Tabela 1:** *Distâncias interatômicas para a molécula de DNA.*

| Nucleotídeo | Distância (Å) |
|-------------|---------------|
| Timina      |               |
| Citosina    |               |



## 6 Considerações finais

- Finalmente esperamos com estes resultados ajudar na compreensão teórica dos impactos das linhagens emergentes no Brasil e também ao redor do mundo.

## 7 Perspectivas futuras

- Repetir as simulações MD com outras distribuições de velocidade para que se tenha maior amostragem, e desta forma poderemos obter resultados mais conclusivos e garantir a reprodutibilidade.

Parte II

## APÊNDICE

Ao longo dos Apêndices são apresentados os resultados

# A Teoria do docking molecular

## A.1 ENTROPIA E ENERGIA LIVRE: A BASE TEÓRICA DAS INTERAÇÕES BIOMOLECULARES

Uma definição rigorosa de entropia requer o uso de conceitos probabilísticos da mecânica estatística, embora possa ser definida como uma medida do grau de aleatoriedade ou desordem de um sistema. A entropia também pode ser associada aos graus de liberdade de átomos e moléculas.

As equações abaixo expressam a constante da taxa de reação associada à Teoria do Estado de Transição.

$$k_1 = \left(\frac{kT}{h}\right) \exp\left(\frac{-\Delta G}{RT}\right) \quad (3)$$

$$k_1 = \left(\frac{kT}{h}\right) \exp\left(\frac{\Delta S}{R}\right) \exp\left(\frac{-\Delta H}{RT}\right) \quad (4)$$

## Bibliografia

- [1] Q. Li, X. Guan, P. Wu, X. Wang, L. Zhou, Y. Tong et al., «Early Transmission Dynamics in Wuhan, China, of Novel Coronavirus–Infected Pneumonia», *New England Journal of Medicine*, vol. 382, n.º 13, pp. 1199–1207, 2020. DOI: [10.1056/NEJMoa2001316](https://doi.org/10.1056/NEJMoa2001316).
- [2] H. Ritchie, E. Ortiz-Ospina, D. Beltekian, E. Mathieu, J. Hasell et al., «Coronavirus Pandemic (COVID-19)», *Our World in Data*, 2020, <https://ourworldindata.org/coronavirus>.

