

# USO DE COMPUTAÇÃO PREDITIVA POR ANCORAGEM MOLECULAR DE COMPOSTOS DO ÓLEO ESSENCIAL DE *COPAIFERA LANGSDORFFII* DESF COMO INIBIDORES DO SARS-COV-2

Rêmullo Brenno Galvão de Miranda Costa<sup>1</sup>, Regildo Max Gomes Martins<sup>2</sup>, Gerlane Souza de Lima<sup>3</sup>, Thayza C. M. Stamford<sup>4</sup>, Maria Aparecida Medeiros Maciel<sup>1</sup>, Francisco Humberto Xavier-Júnior<sup>1\*</sup>  
<sup>1</sup>Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia, Universidade Potiguar (UnP), Natal, RN, Brasil. <sup>2</sup>Programa Multi-institucional de Pós-Graduação em Biotecnologia –PPGBIOTEC, Universidade Federal do Amazonas (UFAM), Manaus, AM, Brasil. <sup>3</sup>Departamento de Nutrição, Universidade Federal do Pernambuco (UFPE), Recife, PE, Brasil. <sup>4</sup>Departamento de Medicina Tropical, Universidade Federal do Pernambuco (UFPE), Recife, PE, Brasil.  
 \*Autor correspondente=

## INTRODUÇÃO

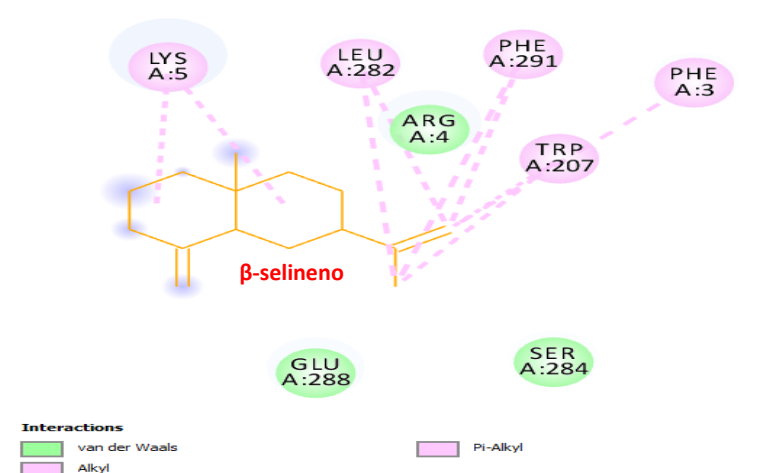
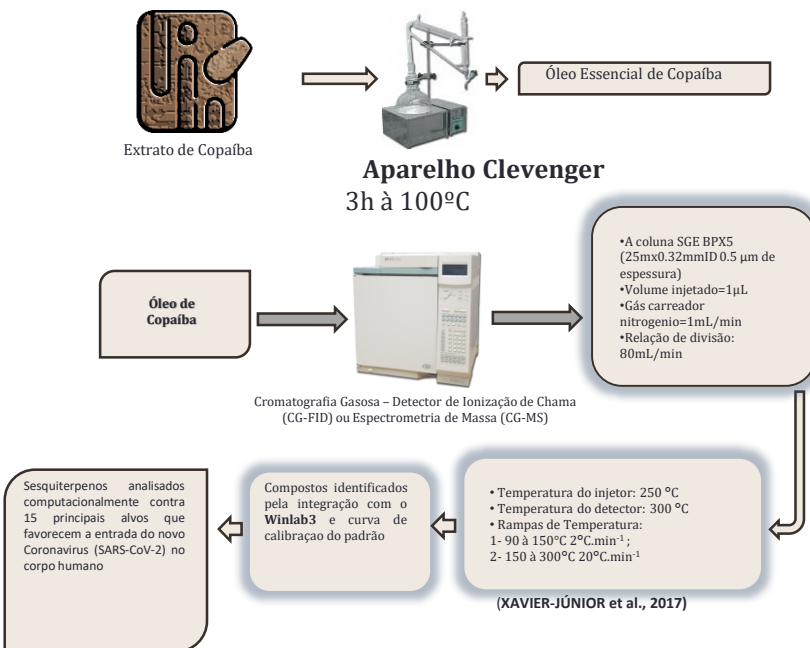
O atual cenário causado pelo novo coronavírus (SARS-CoV-2019) trouxe a imperativa necessidade de desenvolvimento de pesquisas que visem amortizar a taxa de transmissão, a busca da cura e de tratamentos que promovam a redução de mortes de indivíduos acometidos por Covid-19. Neste contexto, a pesquisa de novas substâncias de combate ao vírus que explora compostos naturais oriundos da flora brasileira tem um papel muito importante.

## OBJETIVOS

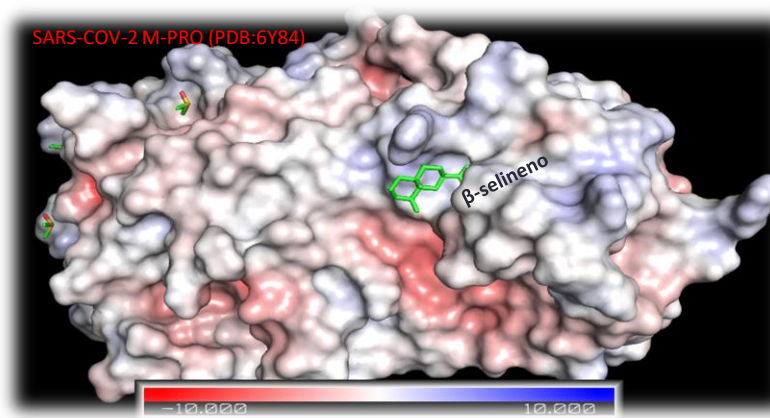
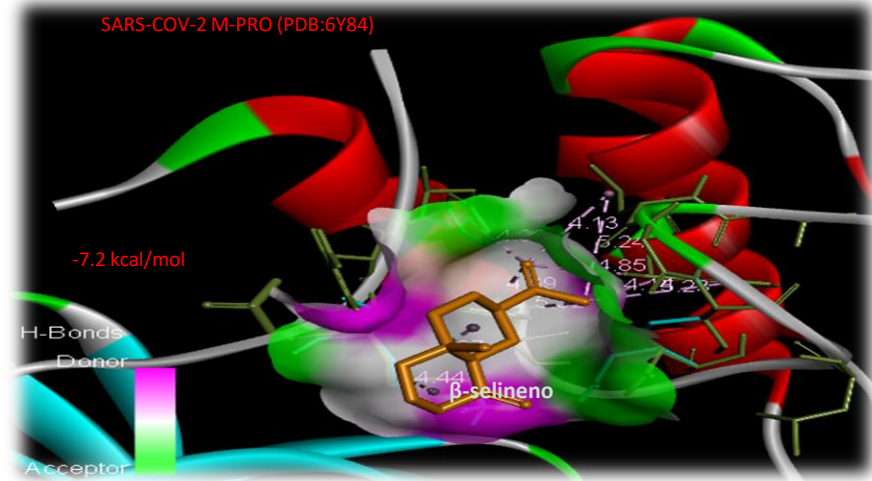
Estudar possíveis moléculas que venham a combater o novo coronavírus através de um estudo experimental *in silico*.

- Determinar a composição química do óleo essencial de *Copaifera Langsdorffii* Desf através de Cromatografia Gasosa
- Estudar a interação *in silico* de moléculas do óleo essencial de *Copaifera Langsdorffii* Desf nas proteases presentes no vírus e também em receptores de células humanas (ECA-2)
- Avaliar, do ponto de vista eletrostático, as interações por meio de APBS (Adaptive Poisson-Boltzmann Solver)

## METODOLOGIA



## RESULTADOS



## CONCLUSÃO

- sesquiterpenos presentes no óleo essencial de *Copaifera langsdorffii* Desf representam uma promissora fonte de obtenção de compostos terapêuticos para utilização contra o novo coronavírus e seus potenciais danos à saúde humana.
- Embora os níveis energéticos sejam satisfatórios para ancoragem molecular, é digno de enfatizar que o presente estudo utilizou apenas métodos computacionais para determinação da interação entre biomoléculas e proteases, sendo portanto, necessário futuros estudos correlacionando estes dados com experimentos *in-vitro* e *in-vivo*.