

INTRODUÇÃO

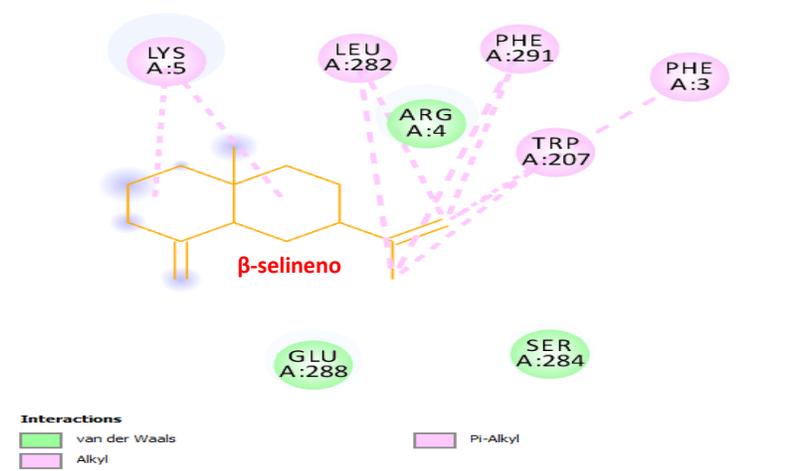
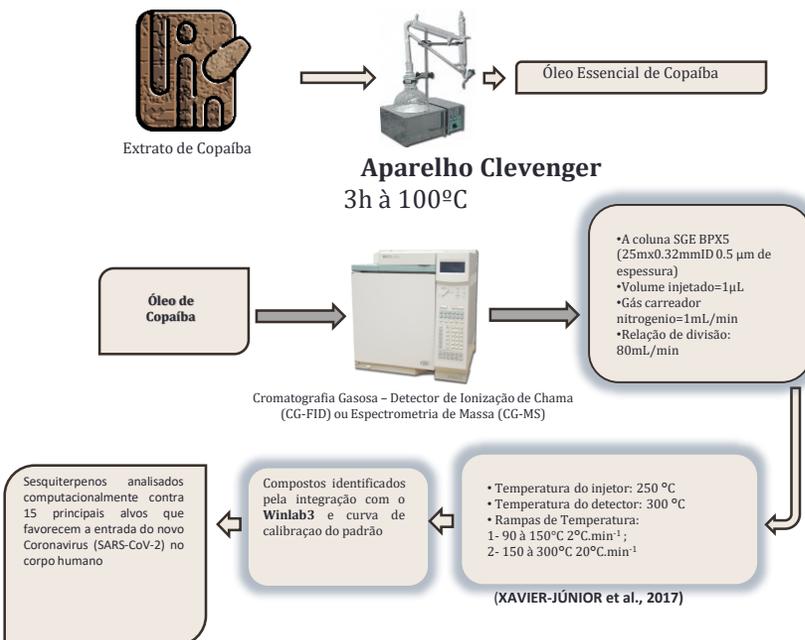
O atual cenário causado pelo novo coronavírus (SARS-CoV-2019) trouxe a imperativa necessidade de desenvolvimento de pesquisas que visem amortizar a taxa de transmissão, a busca da cura e de tratamentos que promovam a redução de mortes de indivíduos acometidos por Covid-19. Neste contexto, a pesquisa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

OBJETIVOS

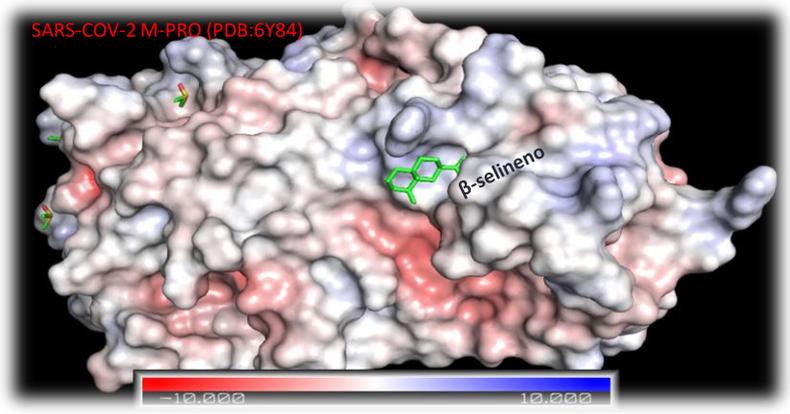
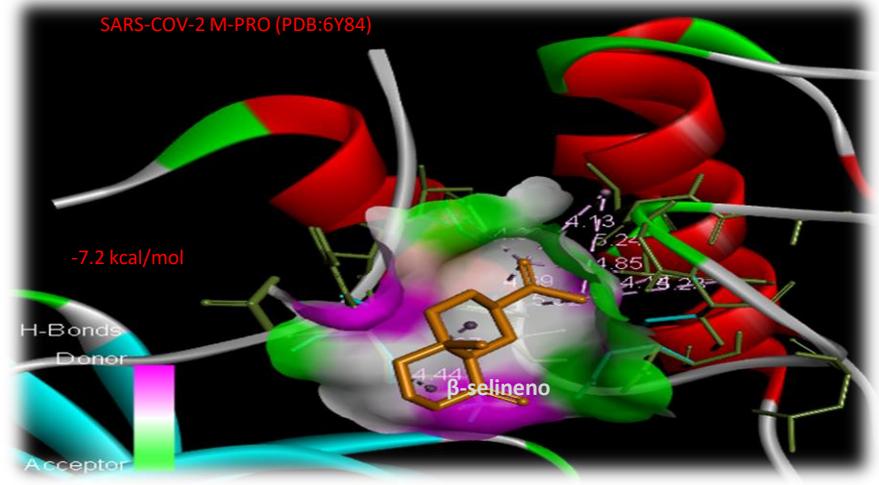
Estudar possíveis moléculas que venham a combater o novo coronavírus através de um estudo experimental *in silico*.

- 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*.