

# REVISÃO DE ESTUDOS IN SILICO SOBRE O REPOSICIONAMENTO DE FÁRMACOS NO COMBATE A SARS-COV-2

V Encontro de Iniciação Acadêmica

Felipe Ferreira Agostinho, Gisele Braga de Sousa, Lívia Lauren Rodrigues de Sousa, Norberto de Kassio Vieira Monteiro

A Síndrome Respiratória Aguda Grave Coronavírus 2 (Sars-Cov-2), é um novo vírus que desencadeou um desastre mundial de saúde, na qual já contaminou milhares de pessoas em mais de 200 países, acarretando inúmeras mortes. Desta forma, uma colaboração mundial de pesquisadores a fim de resolverem esta problemática, em um projeto de cooperação compartilham seus estudos e resultados. O que se concebe até o momento é que não existe uma terapia que apresenta uma real eficácia no combate ao novo coronavírus individualmente, entretanto, alguns fármacos mostram-se promissores no alívio dos sintomas inibindo a atuação. Estes fármacos aplicados no tratamento apresentam formulações diferentes e vias de atuação diferentes. Desta forma, as terapias que apresentam-se promissoras ao combate passam por diversos estudos e testes tanto in-vitro quanto em seres humanos, deste modo, ferramentas auxiliares podem ajudar na escolha de quais destas podem ser prosseguidas com os estudos. A análise computacional demonstra sua efetividade frente a estas análises por sua versatilidade e acurácia do método e validade dos resultados, acelerando consideravelmente os cronogramas de testes. Portanto, para o presente trabalho, realizou-se um estudo da arte a respeito de quais fármacos analisados mundialmente que efetivamente expressou alguma atividade contra o novo vírus com enfoque nos estudos computacionais a fim de promover novas análises, a partir dos dados apresentados na literatura. Isto posto, a disseminação dos resultados de docking, HOMO e LUMO entre outros resultados, a partir de programas como ...(ORCA, ArgusLab, MoCalc)... em diferentes abordagens auxiliam na disseminação e crescimento do conhecimento do que se sabe sobre o Sars-Cov-2 e sobre quais terapias podem ser usadas em seu tratamento.

Palavras-chave: Sars-Cov-2. Fármacos. Estudos Computacionais.