



## EXPLORANDO O POTENCIAL DAS ANÁLISES BIOINFORMÁTICAS NA DESCOBERTA DE FÁRMACOS CONTRA A SARS-COV2: UM RELATO DE EXPERIÊNCIA

Felipe Souza Pinheiro<sup>1</sup> | [202020793@uesb.edu.br](mailto:202020793@uesb.edu.br)

Bruno Silva Andrade<sup>2</sup> | [bandrade@uesb.edu.br](mailto:bandrade@uesb.edu.br)



LABORATÓRIO DE BIOINFORMÁTICA E QUÍMICA COMPUTACIONAL

<sup>1</sup>Graduando em Farmácia, Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Campus Jequié, Brasil.

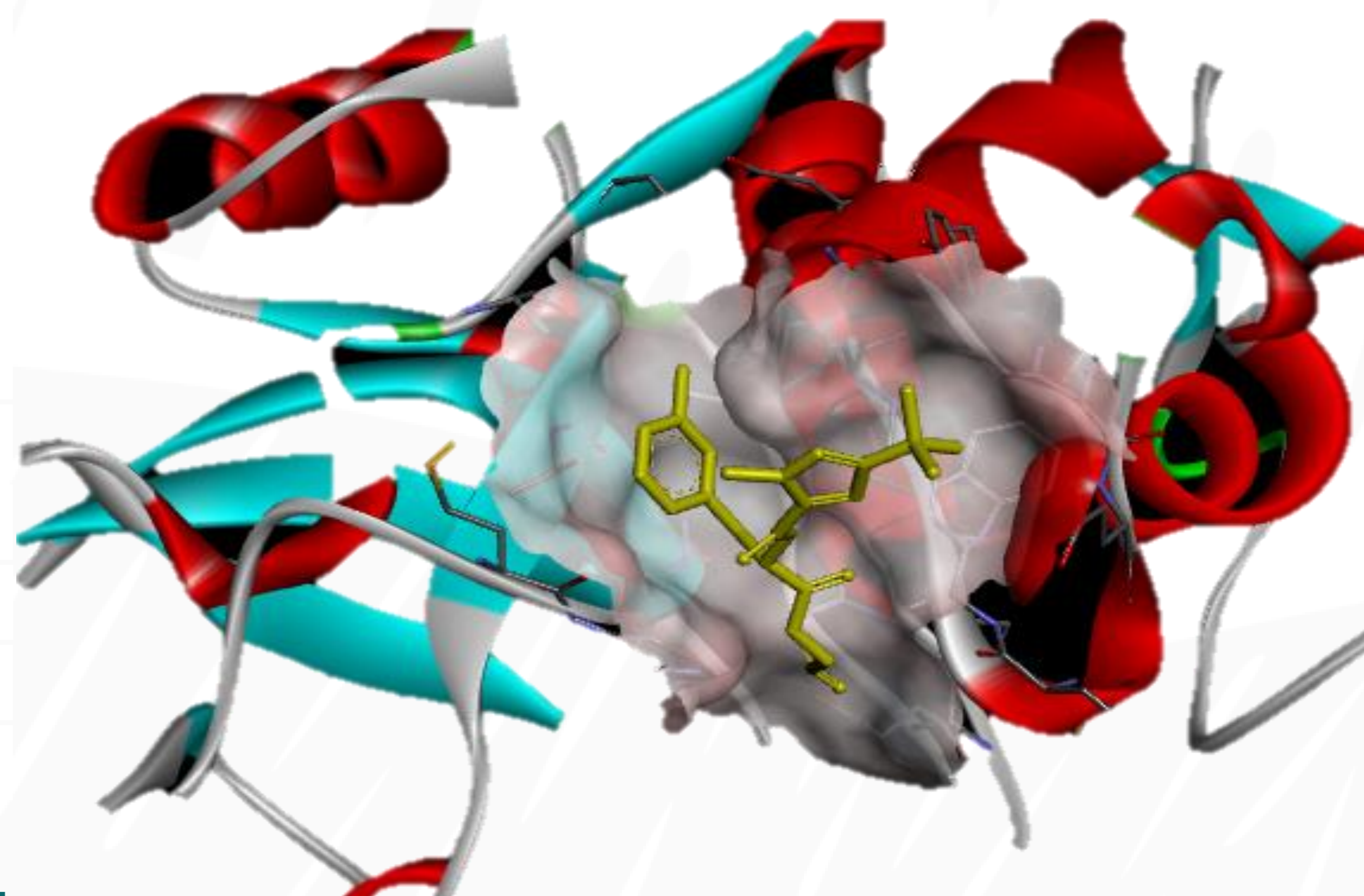
<sup>2</sup>Professor pelo Departamento de Ciências Biológicas, Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Campus Jequié, Brasil.



Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico

### Introdução

A participação neste projeto destacou o impacto das análises bioinformáticas na identificação de candidatos promissores para tratamentos mais seguros e adaptados às necessidades dos pacientes. Essas análises aceleram a descoberta de compostos terapêuticos, oferecendo uma perspectiva promissora para terapias mais eficazes e personalizadas contra a COVID-19, ressaltando o potencial das análises bioinformáticas para futuras emergências de saúde global.



**Figura 01:** Estrutura cristalina da catepsina L em complexo com AZ12878478.

Fonte: Autor

### Metodologia

O estudo *in silico* para busca de potenciais fármacos contra a SARS-CoV-2 envolve uma metodologia de pesquisa experimental computacional que inclui a seleção de alvos terapêuticos, modelagem de estrutura de proteínas, triagem de compostos e análise de interações moleculares.

### Resultados

Como resultado, através dessa experiência, compreendi a importância da bioinformática como uma ferramenta fundamental no desenvolvimento de novos fármacos.

### Considerações Finais

A bioinformática é crucial para desenvolver novos medicamentos, incluindo os contra a SARS-CoV-2. Sua abordagem *in silico* acelera a descoberta de candidatos a fármacos. A colaboração entre especialistas é essencial, enquanto as bolsas de pesquisa sustentam esses avanços. Em síntese, a bioinformática molda o futuro dos tratamentos farmacêuticos, tornando-os mais eficazes e personalizados.

### Referências

1. CAMPOS, Mônica Rodrigues. et al. **Cargas de doença da COVID-19 e de suas complicações e mensuração (DALY) e perspectivas no Sistema Único de Saúde**. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/0102-311X00148920>>. Acesso em: 22/01/2024.
2. MADADLOU, Ashkan. **Food proteins are a potential resource for mining cathepsin L inhibitory drugs to combat SARS-CoV-2**. European Journal of Pharmacology, Volume 885, 2020, 173499, ISSN 0014-2999. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ejphar.2020.173499>. (<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0014299920305914>). Acesso em: 23/01/2024.
3. AKIRA, Fujishima, et al. **A estrutura cristalina da catepsina L humana complexada com E-64**, FEBS Letters, 407, doi: 10.1016/S0014-5793(97)00216-0. Acesso em: 23/01/2024.