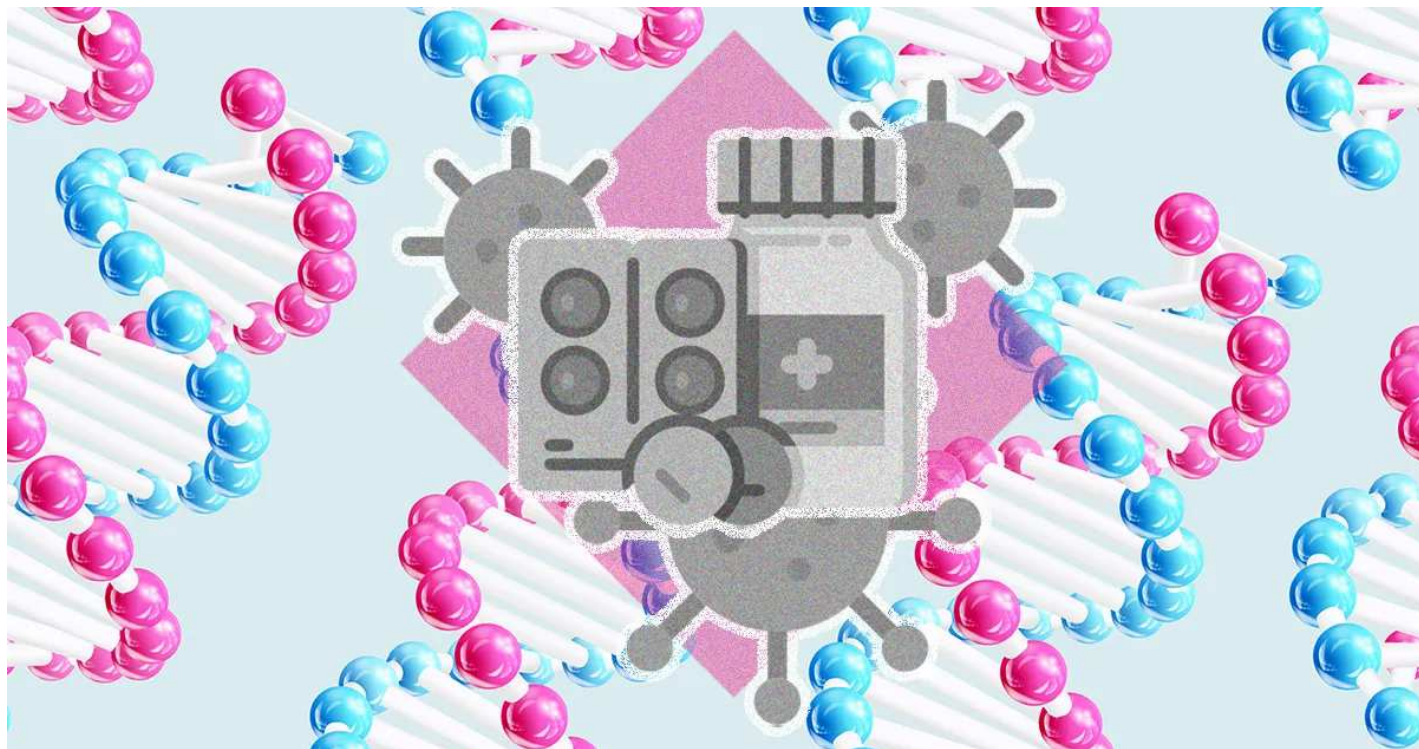


# Descoberta de moléculas é chave para futuros medicamentos contra coronavírus

*Substâncias que se ligam à principal proteína do coronavírus poderão servir de guia para criação de medicamentos contra a covid*



Arte de Livia Magalhães com imagens de Freepik e Flaticon

Pesquisadores do Instituto de Física de São Carlos (IFSC) da USP descobriram cinco moléculas que se ligam à principal proteína do coronavírus, a MPro, essencial para a atividade do vírus causador da covid-19. Os estudos, realizados em laboratório com amostras reais, buscam entender como essas substâncias se ligam às proteínas e qual seu mecanismo de ação no vírus. Os resultados do estudo poderão servir de base para a futura criação de compostos contra o coronavírus, impedindo sua multiplicação, para serem usados em medicamentos.



André Godoy – Foto: Research Gate

“Nesse trabalho, nós buscamos compreender o processo pelo qual a principal proteína do vírus sars-cov-2, causador da covid-19, atinge sua forma ativa”, explica o biólogo André Godoy, do IFSC, que integra o

grupo de pesquisadores envolvidos no trabalho. “Fizemos isso com auxílio de métodos biofísicos associados a análise estrutural no acelerador de partículas Sirius, na linha de luz Manaca, localizado no Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM) em Campinas, interior de São Paulo.”

O estudo focou a principal proteína do coronavírus, a Mpro. “Também chamada de 3CLpro, essa proteína é responsável por cortar a poliproteína do coronavírus em várias proteínas ativas”, ressalta o pesquisador. “Esse processo é essencial para a atividade do vírus.”

Inicialmente, os pesquisadores procuraram identificar pequenas moléculas que se ligam a diversas regiões da proteína Mpro, incluindo seu sítio ativo. “Nossa ideia é que uma delas possa bloquear as funções dessa proteína, impedindo o vírus de completar seu ciclo”, ressalta.

### **Moléculas testadas**

Para identificar substâncias que impedem o funcionamento do vírus, cerca de 10 mil moléculas foram testadas em amostras reais da proteína do vírus sars-cov-2. “Para isso, nós produzimos a proteína em suas diversas formas nos laboratórios do IFSC, em São Carlos”, descreve Godoy. “Em seguida, as análises das amostras são feitas no Sirius.”

O foco das análises era entender como e onde as substâncias se ligam na Mpro. “Ao todo, nós identificamos cinco moléculas que realizaram essa ligação”, ressalta o pesquisador do IFSC, “e agora estamos fazendo análises para entender os efeitos na proteína e no vírus”.

De acordo com o biólogo, os compostos identificados no estudo servem como guias para compreender quais modos de ligação são aceitos pela Mpro. “Eles servem como guias para que possamos desenhar compostos mais eficientes contra o vírus, que, eventualmente, podem ser desenvolvidos em medicamentos.”

O trabalho foi realizado pelos alunos e pesquisadores de pós-doutorado do IFSC. “Além desses, tivemos a enorme contribuição dos cientistas da linha de luz Manaca, do novo acelerador Sirius, localizado no Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais, em Campinas”, aponta Godoy. “Também tivemos suporte de pesquisadores do Diamond Light Source, no Reino Unido, e do Laboratório MAX IV, na Suécia.”

**Mais informações:** e-mail [andregodoy@ifsc.usp.br](mailto:andregodoy@ifsc.usp.br), com André Godoy

### **+ Mais**

- [Em teste de laboratório, P.1 escapa de anticorpos contra primeira linhagem do coronavírus](#)
- [Surtos de covid-19 no futebol expõem falhas no combate à pandemia](#)
- [Teste da saliva permite detectar diferenças na carga viral de coronavírus](#)

*Por Júlio Bernardes – Jornal da USP*