

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos**

**Semana Integrada do Instituto de Física
de São Carlos**

13^a edição

Livro de Resumos

**São Carlos
2023**

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(13: 21-25 ago.: 2023: São Carlos, SP.)
Livro de resumos da XIII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos – Universidade de São Paulo / Organizado
por Adonai Hilário da Silva [et al.]. São Carlos: IFSC, 2023.
358p.

Texto em português.
1. Física. I. Silva, Adonai Hilário da, org. II. Título.

ISSN: 2965-7679

PG29

Reposicionamento farmacêutico do fármaco antiviral Aciclovir: novos sais farmacêuticos

SANTIAGO, Pedro Henrique de Oliveira¹; SILVA, Cecilia Carolina Pinheiro da¹; ELLENA, Javier Alcides²; NUNES, Paulo¹

paulo.ns@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Universidade de São Paulo

Reposicionamento farmacêutico é uma excelente estratégia que oferece vantagens sobre o desenvolvimento tradicional de medicamentos, uma vez que a descoberta de drogas é um processo caro, demorado e altamente arriscado. Particularmente, com o surgimento do novo coronavírus (Sars-CoV-2), declarado pela Organização Mundial de Saúde como patologia pandêmica, surgiu uma enorme necessidade de desenvolver agentes terapêuticos capazes de combater sua infecção. Concomitantemente, fármacos conhecidos e já comercializados, como o Aciclovir (ACV), foram testados para o tratamento contra a COVID-19. ACV é uma droga antiviral bem conhecida, análoga de guanosina, comumente usada para tratar o vírus herpes simplex (HSV), herpes genital e vírus varicela zoster (VZV). O ACV mostrou inibir proteases virais como a Mpro associada ao Sars-CoV-2, ajudando na recuperação de pacientes COVID-19. (1-3) No entanto, o ACV é uma droga classe III/IV da Sistema de Classificação Biofarmaceutico (SCB), com baixa solubilidade aquosa e/ou permeabilidade. Visando melhorar as propriedades farmacocinéticas do ACV, neste trabalho são apresentados dois novos sais inorgânicos com esta do fármaco (nitrato e sulfato), com solubilidade aprimorada. Os novos sais foram avaliados por análises térmicas, espectroscópicas e difração de raios-X.

Palavras-chave: Reposicionamento Farmacêutico. Engenharia de Cristais.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 O'BRIEN, J.J.; CAMPOLI-RICHARDS, D.M. Acyclovir: an updated review of its antiviral activity, pharmacokinetic properties and therapeutic efficacy. *Drugs*, v.37, n.3, p. 233–309. 1989.
- 2 KUMAR, D. *et al.* Promising acyclovir and its derivatives to inhibit the protease of SARS-CoV-2: molecular docking and molecular dynamics simulations. 2020. DOI: 10.21203/rs.3.rs-94864/v1.
- 3 BAKER, V. S. Acyclovir for SARS-CoV-2: an old drug with a new therapeutic purpose—an observational study. *International Journal of Clinical Case Reports and Reviews*, v. 10, n.2, p. 0199-1-0199-7, 2022.