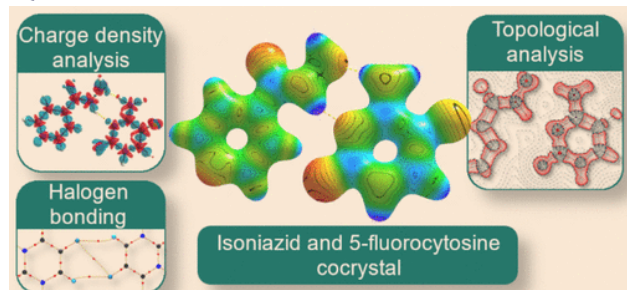


24 de julho de 2024

Novas metodologias para estudo de produtos farmacêuticos – Física Quântica e Cristalografia Quântica



Com base em um estudo anteriormente realizado, pesquisadores do Laboratório Multiusuário de Cristalografia Estrutural (LAMUCRES) do Instituto de Física de São Carlos (IFSC/USP), concluíram recentemente uma pesquisa que teve o foco na aplicação de novas metodologias para o estudo de produtos farmacêuticos, particularmente para tentar entender melhor como esses produtos funcionam e, em função disso, procurar melhorá-los sabendo qual o seu funcionamento em nível quântico. Isso vai permitir obter novos modelos que, no futuro, abram portas para obter materiais e medicamentos melhorados que apresentem novas atividades. A importância desta pesquisa está relacionada com a inovação proposta para a indústria farmacêutica em relação à introdução da física quântica e, neste particular aspecto, na Cristalografia Quântica.

Adilson Wanderley e Camila Pinto são dois dos autores do artigo científico que foi publicado recentemente na prestigiada revista “Crystal Growth & Design”, inclusive com capa de destaque, tendo como pesquisador principal o Prof. Dr. Javier Ellena (IFSC/USP). “Esta é a segunda etapa de uma pesquisa cujo desenvolvimento teve início em 2017 no LAMUCRES, onde basicamente desenhamos um novo medicamento que consegue juntar dois insumos farmacêuticos, dois princípios ativos, em um só. Em grosso

modo, ao invés de um paciente tomar dois comprimidos para uma determinada doença, ele vai apenas tomar um que apresenta uma eficácia maior, contendo uma quantidade menor do medicamento. A ideia por trás da nossa pesquisa é determinar como você consegue juntar esses dois insumos, esses dois princípios ativos em um único só”, salienta Adilson Wanderley, acrescentando que a necessidade de se juntar esses dois princípios ativos em um único comprimido tem como vantagem a possibilidade de que no organismo eles se separem, agindo com a mesma eficácia e sem perder as suas propriedades.

A pesquisadora Camila Pinto acrescenta que o que a equipe fez foi avaliar a modificação da distribuição eletrônica no fármaco quando ele é cocrystalizado com outro fármaco. “Quando a gente tem essas duas moléculas juntas, uma vai influenciar a outra e aí vai ter uma variação na distribuição eletrônica. A partir disso, conseguimos avaliar interações, ligações, e aí conseguimos entender o que está originando a cristalização conjunta dessas duas moléculas para, no futuro, quem sabe, podermos fazer de forma mais previsível o processo de cocrystalização de outros fármacos”, salienta a pesquisadora.

O Prof. Javier Ellena explica que esta pesquisa é composta por várias etapas, sendo que a primeira foi desenvolvida por dois alunos de mestrado do LAMUCRES, Matheus da Silva Souza e Luan Farinelli Diniz, que, em 2017, desenharam um composto unindo um fármaco utilizado para combater a tuberculose e um outro utilizado para combater fungos.

“Nesse início da pesquisa cocrystalizamos os dois fármacos e obtivemos um medicamento novo que permite tratar problemas relacionados com o câncer de pulmão e problemas fúngicos concomitantes derivados da tuberculose. Isso permite tratar situações de saúde que hoje são preocupantes, como, por exemplo, em pacientes com HIV, que são imunodeficientes, sendo que a tuberculose é uma enfermidade característica nesses pacientes, já que ela é “oportunista”. Uma vez curada a tuberculose, fica como resultado da doença, como sequelas, os fungos que se alojam nos pulmões e isso é um processo difícil de tratar. Então, esse medicamento tem o intuito de cobrir essas áreas, em simultâneo, atendendo às duas situações”, pontua o pesquisador.

Segundo o Prof. Javier Ellena, atualmente, para o mesmo caso acima descrito, a forma de tratamento compreende a utilização de dois medicamentos diferentes, sendo que a nova fórmula desenvolvida anteriormente pelo LAMUCRES aumenta os índices de êxito, diminuindo a quantidade de medicamentos que os pacientes têm que ingerir: ou seja, doses menores, menos chances de interação medicamentosa, menos efeitos colaterais e a eliminação de incompatibilidades, atingindo assim os mesmos resultados nos pacientes.

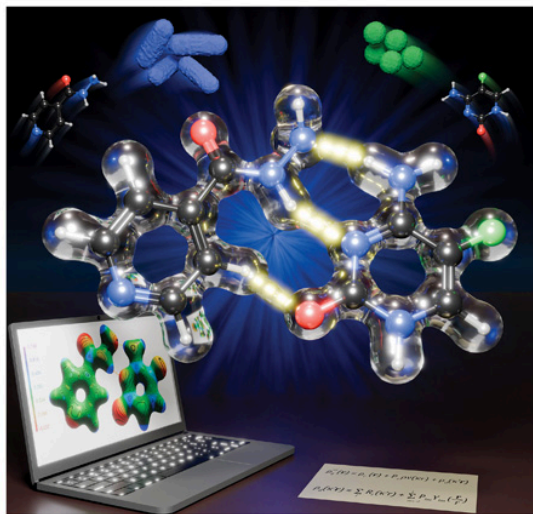


Os pesquisadores Adilson Wanderley e Camila B. Pinto

CRYSTAL GROWTH & DESIGN

pubs.acs.org/crystal

INTEGRATING THE
FIELDS OF CRYSTAL
ENGINEERING AND
CRYSTAL GROWTH FOR
THE SYNTHESIS
AND APPLICATIONS
OF NEW MATERIALS



ACS Publications
Most Trusted. Most Cited. Most Read.

www.acs.org

Capa da revista científica com o estudo em destaque

Cristalografia Quântica



Prof. Javier Ellena

O que os pesquisadores Adilson Wanderley, Camila b. Pinto e colegas fizeram agora foi estudar o novo sólido farmacêutico desenvolvido por Diniz e Souza, mas em nível quântico, eletrônico, algo que se posiciona muito para além dos habituais estudos em nível molecular, ou seja, obterem uma informação de qual é a deformação de densidade de carga que permite que esse medicamento tenha essa atividade. “Sabendo isso, pode-se B. antever quais serão as modificações que são necessárias fazer para melhorar essa atividade. É uma espécie de modelo “fechadura/chave”. Você não conhece a fundo a “fechadura”, mas a partir deste momento sabe, em nível eletrônico, como é a “chave”, sabe onde e como ela funciona e, a partir daí, pode utilizar esse conhecimento rumo a novos avanços no desenvolvimento de novos e melhores medicamentos, mais baratos e eficazes, cujo resultado está patente no artigo que foi capa de revista publicado por Adilson, Camila e restantes colegas”, adianta o Prof. Javier Ellena. A aplicação da Cristalografia Quântica no desenvolvimento de fármacos é a ideia inovadora deste artigo e foi esse diferencial que levou a sua publicação com destaque na capa de tão prestigiada revista.

Esta pesquisa, tal como muitas outras que são realizadas no IFSC/USP, envolveu uma equipe multidisciplinar, algo que é extremamente importante para o sucesso do estudo. “Você tem que interagir e trabalhar com cientistas de áreas diferentes, como, por exemplo, físicos, químicos, biólogos e farmacêuticos, entre outros, e o LAMUCRES é muito forte nessas interações que desaguam em trabalhos e estudos complexos”, pontua Adilson Wanderley, acrescentando que este é um trabalho demorado, cujo intuito é tentar chegar ainda mais longe para que essa dupla ação possa ser eficaz independentemente de qual for a doença.

Por último, Camila Pinto acredita que estes estudos podem abrir novas fronteiras, como a realização de estudos parecidos, só que para outros sistemas. “Agora, a intenção será fazer o mesmo tipo de estudo, mas para co-cristais de outros fármacos. Por quê? Para aumentar o conhecimento em geral sobre a forma como essas interações acontecem para, lá mais na frente, conseguir prever como os fármacos interagem , facilitando o desenvolvimento de novos medicamentos e visando contribuir de forma mais eficaz para uma melhor administração de fármacos”, finaliza a pesquisadora.

Assinam este estudo os pesquisadores Adilson B. Wanderley, Camila B. Pinto (primeira autora), Juan C. Tenorio, Ithosvany Camps, Christian W. Lehmann e o Prof. Javier Ellena.

Para conferir o artigo científico relativo a esta pesquisa, clique [AQUI](#).