

Erica de Sousa Conrado

Kathia Maria Honório

Universidade de São Paulo

01 de maio de 2023

Querido Kenneth M. Merz, Jr.,

Nós desejamos submeter um artigo de pesquisa original intitulado “ Dinâmica Molecular do ácido nordihidroguaiarético, potencial inibidor do vírus SARS-CoV-2” para consideração pela Journal of Chemical Information and Modeling.

Atestamos que este manuscrito não foi publicado em outro lugar e não está sob consideração por outro periódico. Todos os autores aprovaram a versão final do manuscrito e estão de acordo com a sua submissão ao periódico Journal of Chemical Information and Modeling

Neste artigo, nós apresentamos que o ácido nordihidroguaiarético pode ser um potencial fármaco para a SARS-CoV-2. Isto porque, no ensaio de dinâmica molecular a ligação entre este composto e o sítio ativo da Main Protease deste vírus ocorreram significativas ligações de hidrogênio com resíduos importantes.

Nós acreditamos que este manuscrito é apropriado para publicação do Journal of Chemical information porque contém uma simulação computacional usando dinâmica molecular e métodos de energia livre.

Não temos conflitos de interesse a divulgar.

Por favor, envie toda a correspondência relativa a este manuscrito para mim em ericaconrado@usp.br .

Obrigada por considerar a publicação deste manuscrito.

Sinceramente,

Erica de Sousa Conrado