

# Diversidade organizada

Núcleo lança base de dados sobre compostos químicos com potencial para gerar fármacos

Informações detalhadas sobre 640 compostos químicos extraídos da biodiversidade brasileira estão disponíveis para consulta na internet, no endereço [www.nubbe.iq.unesp.br/nubbeDB.html](http://www.nubbe.iq.unesp.br/nubbeDB.html). A base de dados reúne o conhecimento gerado em 15 anos de pesquisas do Núcleo de Bioensaios, Biossíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais (NuBBE) da Universidade Estadual Paulista (Unesp), em Araraquara. “Constatamos que os nossos resultados de pesquisa, publicados em mais de 170 artigos, poderiam ser mais úteis se organizados em uma base de dados do que fragmentados. Temos informações valiosas sobre a diversidade química das espécies estudadas e resolvemos disponibilizá-las para que outros pesquisadores possam utilizar estes dados em estudos adicionais”, diz Vanderlan Bolzani, professora do Instituto de Química (IQ) da Unesp em Araraquara e membro da coordenação do programa Biota-FAPESP. A base de dados foi idealizada em colaboração com o professor Adriano D. Andricopulo, do Laboratório de Química Medicinal e Computacional (LQMC) do Instituto de Física (USP - São Carlos), e seu aluno de doutorado Ricardo N. Santos, bolsista da FAPESP.

## PROPRIEDADES IDENTIFICADAS

A ferramenta reúne informações diversas, como a origem dos compostos, a espécie de onde foram isolados, suas propriedades químicas e atividades biológicas identificadas. O resultado da pesquisa *on-line* permite também ver a estrutura



Estudos sobre a busca de fármacos em espécies de Rubiaceae, como o cafeeiro, abastecem a ferramenta *on-line*

química, uma tabela de informações dos compostos e baixar a estrutura em três dimensões. A base de dados do NuBBE é integrada por 80% de compostos isolados de plantas, 6% de fungos ou microrganismos, 7% de compostos sintéticos inspirados em produtos naturais, 5% de compostos semissintéticos e 2% de produtos de biotransformação (modificados por enzimas). Um conjunto de propriedades ajuda a definir se o composto tem algum potencial para ser utilizado no planejamento de novos fármacos. “A base é quimicamente diversificada e rica. Trata-se de uma fonte interessante para identificação de compostos bioativos para serem testados em outros ensaios mais sofisticados”, diz Vanderlan Bolzani. Seu trabalho sobre a busca de substâncias anticancerígenas em espécies de Rubiaceae brasileiras, feito na década de 1990, é um dos mais antigos da base de dados.

A sistematização dos dados foi feita por uma equipe de seis pessoas, entre técnicos e pesquisadores, e durou dois anos. O *site* da base de dados foi idealizado pelo mestre em ciência da com-

putação Leandro Figueira. “Uma aluna de iniciação científica nos auxiliou na análise de todos os *papers* do NuBBE e na obtenção de dados dos compostos”, diz Marília Valli, aluna de doutorado do IQ da Unesp e bolsista da FAPESP, que trabalha num projeto sobre o potencial dos produtos naturais do NuBBE como fonte para o planejamento racional de novos agentes antitumorais. A tese de Marília, orientada por Vanderlan, deve ser concluída em 2013. Uma das ambições do projeto é cruzar as informações do NuBBE com o Sistema de Informação Ambiental (Sinbiota), que relaciona informações geradas por projetos do programa Biota-FAPESP com uma base cartográfica. “Ainda não está disponível, mas queremos mostrar as espécies a que os compostos estão relacionados e o habitat em que elas vivem. Esperamos que esta base seja o ponto de partida para um banco de dados nacional de todas as substâncias já isoladas dos biomas brasileiros. Temos que sensibilizar os colegas do valor que representaria tal tarefa”, diz Vanderlan. ■

Fabrcio Marques