

Diversidad organizada

Un núcleo de investigación lanza una base de datos sobre compuestos químicos con potencial para generar fármacos

PUBLICADO EN OCTUBRE DE 2012

En la dirección electrónica www.nubbe.iq.unesp.br/nubbeDB.html se encuentran disponibles para su consulta, informes minuciosos sobre 640 compuestos químicos extraídos de la biodiversidad brasileña. La base de datos aglutina el conocimiento generado durante 15 años de investigaciones por el Núcleo de Bioensayos, Biosíntesis y Ecofisiología de Productos Naturales (NuBBE) de la Universidade Estadual Paulista (Unesp), con sede en la ciudad de Araraquara. “Constatamos que nuestros resultados de investigación, publicados en más de 170 artículos, podrían ser de mayor utilidad si se organizaran en una base de datos en lugar de aparecer fragmentados. Contamos con valiosas informaciones sobre la diversidad química de las especies estudiadas y decidimos ponerlas a disposición para que otros investigadores puedan utilizar esos datos en estudios adicionales”, dice Venderlan Bolzani, docente del Instituto de Química (IQ) de la Unesp de Araraquara y miembro de la coordinación del programa Biota-FAPESP. La base de datos se proyectó en colaboración con el profesor Adriano D. Andricopulo, del Laboratorio de Química Medicinal y Computacional (LQMC) del Instituto de Física (USP-São Carlos), y su alumno de doctorado Ricardo N. Santos, becario de la FAPESP.

PROPIEDADES IDENTIFICADAS

Esta herramienta agrupa diversas informaciones, tales como el origen de los compuestos, la especie de la cual fue-



Los estudios sobre la búsqueda de fármacos en especies de *Rubiaceae*, tales como el cafeto, aportan a la herramienta *online*

ron aislados, sus propiedades químicas y las actividades biológicas identificadas. El resultado de la investigación *online* también permite observar su estructura química, un gráfico con información de los compuestos y bajar la estructura en tres dimensiones. La base de datos del NuBBE está integrada por un 80% de compuestos aislados de vegetales, un 6% de hongos o microorganismos, un 7% de compuestos sintéticos inspirados en productos naturales, un 5% de compuestos semisintéticos y un 2% de productos de biotransformación (modificados por enzimas). Un conjunto de propiedades ayuda a definir si el compuesto posee algún potencial de utilidad en la planificación de nuevos fármacos. “La base es químicamente diversificada y rica. Se trata de una fuente interesante para la identificación de compuestos bioactivos que pueden testarse en otros ensayos más sofisticados”, dice Vanderlan Bolzani. Su trabajo sobre la búsqueda de sustancias anticancerígenas en especies de *Rubiaceae* brasileñas, llevado a cabo durante la década de 1990, es uno de los más antiguos de la base de datos.

La sistematización de los datos estuvo a cargo de un equipo integrado por seis personas, entre técnicos e investigadores,

y se extendió durante dos años. El sitio *web* de la base de datos fue diseñado por el máster en ciencias de la computación Leandro Figueira. “Una alumna de iniciación científica nos ayudó en el análisis de todos los *papers* del NuBBE y en la obtención de datos de los compuestos”, dice Marília Valli, alumna de doctorado del IQ de la Unesp y becaria de la FAPESP, quien trabaja en un proyecto sobre el potencial de los productos naturales del NuBBE como fuente para la planificación racional de nuevos agentes antitumorales. La tesis de Valli, con la dirección de Bolzani, estará lista en 2013. Uno de los objetivos del proyecto consiste en cruzar las informaciones del NuBBE con el Sistema de Información Ambiental (Sinbiota), que relaciona la información generada por proyectos del programa Biota-FAPESP con una base cartográfica. “Todavía no se encuentra disponible, pero pretendemos mostrar las especies con las que se relacionan los compuestos y también su hábitat. Anhelamos que esta base sea el punto de partida para un banco de datos nacional de todas las sustancias que se han aislado en los biomas brasileños. Debemos convencer a los colegas del valor que supondría tal tarea”, dice Bolsani. ■ **Fabício Marques**