

Diversité organisée

Un groupe de recherche lance une base de données sur des composés chimiques susceptibles d'aider à la fabrication de médicaments

PUBLIÉ EN OCTOBRE 2012

Des informations détaillées sur 640 composés chimiques extraits de la biodiversité brésilienne sont disponibles sur Internet à l'adresse suivante : www.nubbe.iq.unesp.br/nubbeDB.html. Cette base de données est le fruit de 15 années de recherche du Groupe de Bioessais, Biosynthèse et Écophysiologie de Produits Naturels (NuBBE) de l'Universidade Estadual Paulista (Unesp) d'Araraquara. Vanderlan Bolzani, professeur de l'Institut de Chimie (IQ) de l'Unesp et membre de la coordination du programme Biota-FAPESP, déclare : « Nous avons constaté que nos résultats de recherche, publiés dans plus de 170 articles, pourraient être plus utiles s'ils étaient organisés en une base de données plutôt que fragmentés. Nous possédons des informations précieuses sur la diversité chimique des espèces étudiées et avons décidé de les mettre à disposition pour que d'autres chercheurs puissent les utiliser dans des études additionnelles ». La base de données a été conçue en collaboration avec le professeur Adriano D. Andricopulo, du Laboratoire de Chimie Médicinale et Computationnelle (LQMC) de l'Institut de Physique (USP, São Carlos) et son étudiant de doctorat Ricardo N. Santos, boursier de la FAPESP.

PROPRIÉTÉS IDENTIFIÉES

L'instrument réunit diverses informations telles que l'origine des composés, l'espèce d'où ils ont été isolés, leurs propriétés chimiques et les activités biologiques identifiées. Le résultat de la recherche en ligne permet aussi de voir la structure chimique,



Des études sur la quête de médicaments sur des espèces de Rubiaceae, comme le caféier, alimentent l'instrument *en ligne*

un tableau d'informations sur les composés, et de télécharger la structure en trois dimensions. La base de données du NuBBE est composée de 80 % de composés isolés de plantes, 6 % de champignons ou microorganismes, 7 % de composés synthétiques inspirés de produits naturels, 5 % de composés semi-synthétiques et 2 % de produits de biotransformation (modifiés par des enzymes). Un ensemble de propriétés aide à déterminer si le composé pourrait être utilisé dans la production de nouveaux médicaments. D'après Vanderlan Bolzani, « la base est chimiquement diversifiée et riche. Il s'agit d'une source intéressante pour l'identification de composés bioactifs à tester dans d'autres essais plus sophistiqués ». Son travail sur la quête de substances anticancérigènes sur des espèces de Rubiaceae brésiliennes, réalisé dans les années 1990, est l'un des plus anciens de la base de données.

La systématisation des données a été faite par une équipe de six techniciens et chercheurs, sur une période de deux ans. Quant au site, il a été idéalisé par Leandro Figueira, maître en informatique. « Une

boursière d'initiation scientifique nous a aidé à analyser tous les articles du NuBBE et à obtenir les données sur les composés », précise Marilia Valli, elle-même docteurante de l'Institut de Chimie de l'Unesp et boursière de la FAPESP. Dirigée par Vanderlan Bolzani, sa thèse sur le potentiel des produits naturels du NuBBE pour la planification rationnelle de nouveaux agents anti-tumeurs devrait être achevée en 2013. L'un des objectifs du projet est de croiser les informations du NuBBE avec le Système d'Information Environnementale (Sinbiota), qui met en rapport des informations issues des projets du programme Biota-FAPESP et une base cartographique. Si ce n'est pas encore disponible, Madame Bolzani affirme cependant que le but est « montrer les espèces auxquelles sont liés les composés ainsi que l'habitat dans lequel elles vivent. Nous espérons que cette base sera le point de départ pour une banque de données nationale de toutes les substances déjà isolées des biomes brésiliens. Nous devons sensibiliser les collègues à la valeur que représenterait cette tâche ». ■

Fabricao Marques