

# USP e Unesp criam base de dados de produtos naturais

A parceria entre cientistas da USP e da Universidade Estadual Paulista (Unesp) resultou na criação de uma Base de Dados Brasileira de Produtos Naturais que já está disponível na internet. A NuBBE Database é inédita e disponibiliza informações de mais de 650 moléculas de compostos de origem natural isolados da biodiversidade brasileira.

Na nova base de dados, cientistas e pesquisadores que trabalham no desenvolvimento de fármacos terão acesso gratuito a informações sobre produtos naturais, como origem, estrutura molecular, classificação, estrutura molecular 3D, massa e volume moleculares, solubilidade e ligações de hidrogênio, entre outras. De acordo com a professora Vanderlan Bolzani, da Unesp, “estes parâmetros são fundamentais quando se investiga uma substância natural visando um protótipo com finalidade farmacêutica”. Vanderlan e o professor Adriano D. Adricopulo, do Laboratório de Química Medicinal e Computacional (LQMC), do Instituto de Física de São Carlos (IFSC) da USP, são os coordenadores do projeto. A NuBBE Database nasceu da cooperação entre o Núcleo de Bioensaios, Biossíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais (NuBBE), da Unesp, campus de Araraquara, e o LQMC-IFSC.

A colaboração de Andricopulo para a parceria veio, principalmente, de sua larga experiência na criação da Base de Dados de Propriedades Farmacocinéticas batizada de PK/DB (<http://www.pkdb.ifsc.usp.br>), primeira do gênero na América Latina e que foi desenvolvida no IFSC com tecnologia inteiramente nacional. “Esta base já está no ar há cerca de cinco anos e proporciona aos pesquisadores estudar as propriedades de fármacos conhecidos, bem como explorar o potencial de novas moléculas”, descreve. Ele conta que a PK/DB levou cerca de sete anos para ser elaborada possuindo, atualmente, mais de 4 mil fármacos descritos. Andricopulo conta que receberam diversas propostas de comercialização da base. “Mas a ideia é manter o acesso público e gratuito a cientistas e estudantes de todas as partes do mundo”, afirma.

## RECONHECIMENTO INTERNACIONAL

Recentemente a NuBBE Database passou a integrar a zinc que é, segundo Andricopulo, a maior base de dados de moléculas do mundo. Foi estabelecido um link cruzado entre as duas bases. O Zinc é um serviço do Laboratório Shoichet, do Departamento de Química Farmacêutica da Universidade da Califórnia, San Francisco (UCSF), nos EUA.

Outro reconhecimento foi a recente publicação do artigo “Development of a Natural Products Database from the Biodiversity of Brazil” no *Journal of Natural Products*, que é considerado um dos mais importantes periódicos do mundo na área de química de produtos naturais.

A constituição da NuBBE Database foi um trabalho que durou entre dois e três anos, sendo o resultado da experiência dos dois grupos de pesquisas de mais de três décadas. A segunda etapa do projeto prevê

## PESQUISA

Postado em 14/05/2013

---

a participação de outros grupos que estudam a biodiversidade brasileira. Para a professora Vanderlan, “entender o universo molecular da biodiversidade é avançar no conhecimento sobre as espécies de ambientes tropicais e equatoriais como o nosso, para poder reproduzir biotecnologia ou sintetizar tais compostos em laboratório”. O Brasil reúne cerca de 20% de todas as espécies do planeta.

Além da professora Vanderlan e de Andricopulo, colaboraram na constituição da base os doutorandos Marília Valli, do NuBBE, e Ricardo Nascimento dos Santos, do LQMC. Os dois, bolsistas da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (Fapesp), sistematizaram dados de mais de 170 artigos científicos produzidos no NuBBE.

**Fonte: Agência USP de Notícias**