Pesquisas criam Fármacos

Química

Enviado por: simonesinara@seed.pr.gov.br

Postado em:20/03/2017

Pesquisas ajudam a criar medicamentos com técnicas de computação Por Diego C. Smirne - Editorias: Ciências da Saúde, Ciências Exatas e da Terra Um grupo multidisciplinar da Escola de Artes, Ciências e Humanidades (EACH) da USP alia química, ensaios biológicos e computação para identificar e criar substâncias com potencial para se tornarem novos fármacos. A professora da EACH Káthia Maria Honório, que lidera a pesquisa, trabalha na área de química medicinal computacional desde a iniciação científica ainda no Instituto de Química de São Carlos (IQSC) da USP. Com base em um determinado alvo biológico que pode causar uma doença, o grupo analisa substâncias para descobrir quais componentes de sua estrutura poderiam ser usados num fármaco para inibir ou potencializar a ação do alvo, dependendo do interesse. “O que nós fazemos é como montar um quebra-cabeças, encontrando as enzimas e proteínas mais eficientes para tratar uma determinada doença e compor um medicamento. Mas isso é apenas uma parte do trabalho de drug design, uma pesquisa de base mesmo, e a modelagem computacional e a interdisciplinaridade são essenciais”, diz a professora. Uma das técnicas utilizadas pelos pesquisadores é chamada de virtual screening (triagem virtual), por meio da qual é possível analisar um banco de dados de moléculas disponíveis comercialmente e montar um ranking baseado na interação entre elas e o alvo biológico estudado. Agregado a essa ferramenta, o conhecimento químico dos pesquisadores compensa eventuais falhas e, assim, a equipe pode contar com um índice elevado de aproveitamento das substâncias selecionadas. Káthia ressalta a importância da computação e dos pesquisadores da área que compõem a equipe para chegar aos resultados: “Os métodos computacionais são muito úteis pois nos ajudam a economizar tempo, dinheiro e esforços na identificação das substâncias de que precisamos”. “Depois que selecionamos as substâncias, adquirimos comercialmente amostras delas ou as sintetizamos (se não estiverem disponíveis no mercado) e realizamos os testes biológicos para verificar sua eficácia”, explica a professora. “Num experimento com um alvo ligado ao diabetes, por exemplo, selecionamos, a partir da triagem virtual, cinco substâncias, das quais três apresentaram resultados bastante promissores na interação, comprovando a eficácia dos modelos computacionais.” Além do diabetes, o grupo coordenado por Káthia também faz pesquisas com alvos relacionados principalmente ao câncer de mama e, recentemente, iniciou uma parceria com o professor João Lago, da Universidade Federal do ABC, focada no desenvolvimento de fármacos para doenças negligenciadas como a leishmaniose e a doença de Chagas. Esta notícia foi publicada em 16/03/2017 no site Jornal da USP. Todas as informações são de responsabilidade do autor.