

## MOLÉCULAS SÃO TESTADAS PARA REALIZAR O CONTROLE DE DOENÇAS

*Por meio de modelos computacionais, é feita a simulação das substâncias bioativas*

Moléculas que inibem a atividade do fator transformador de crescimento beta (TGF $\beta$ ), responsável por estimular a divisão celular, são pesquisadas na Escola de Artes, Ciências e Humanidades (EACH) da USP. As moléculas, planejadas e selecionadas por meio de técnicas de química medicinal computacional, poderão ser usadas como possíveis fármacos destinados ao controle do câncer, arterosclerose e outras doenças. Até o início de 2012, deverá ser concluída a escolha das moléculas que serão submetidas a testes biológicos.

O TGF $\beta$  é uma molécula produzida em vários locais do organismo e está relacionado a processos biológicos em diversas fases da vida. "Durante a fase embrionária, por exemplo, ele se liga ao receptor biológico e sinaliza a divisão celular, estimulando o crescimento", diz a professora da EACH, Kathia Maria Honório, que coordena a pesquisa. "Essa mesma molécula, no caso de doenças como o câncer ou arterosclerose, por exemplo, pode sinalizar de forma desenfreada a divisão de células anormais, como as que formam tumores, levando a processos nocivos ao corpo".

A pesquisa procura identificar mo-



léculas que tenham a capacidade de se ligar aos receptores biológicos, inibindo a sinalização que desencadeia a divisão celular. "Uma vez comprovada sua ação, essas moléculas poderão ser usadas como fármacos para controlar o desenvolvimento de doenças", afirma Káthia.

Por meio de modelos computacionais, é feita a simulação das substâncias bioativas e de seu contato com os receptores biológicos, num processo conhecido como docagem molecular. "Nesta etapa são planejadas moléculas que se encaixem nos receptores", conta a professora. "Esse planejamento e as simulações são feitos a partir de informações sobre as proteínas e enzimas que compõem os receptores".

**Testes** - As pesquisas se encontram em fase de triagem virtual, realizada em um computador que possui uma base

de dados constituída para a pesquisa, contendo milhares de moléculas para simular a interação com os receptores biológicos e selecionar aquelas que possuem maior afinidade e são candidatas à utilização em fármacos. "Este processo deverá estar concluído até o início de 2012", planeja a pesquisadora.

Depois da síntese ou obtenção das moléculas selecionadas, elas serão submetidas a testes biológicos para verificar se existe afinidade real com os receptores. "Se os resultados forem positivos, será feita uma nova etapa de testes, inicialmente com animais (pré-clínicos) e depois com seres humanos (clínicos) para que as moléculas possam ser usadas em fármacos", diz Kathia.

A professora está em contato com pesquisadores de outras áreas, especialmente síntese de moléculas e testes biológicos, visando à continuidade das pesquisas após a definição das moléculas candidatas. "Os estudos em química medicinal para a obtenção de novos fármacos exigem uma grande rede de colaboração", ressalta. A triagem computacional é realizada no Laboratório de Química Medicinal Computacional da EACH.

## VACINAS TRANSGÊNICAS GARANTEM MAIOR SEGURANÇA E EFICÁCIA

*Genética fornece novas possibilidades para prevenção de doenças*

As novas possibilidades de vacinas transgênicas tendem a ser mais seguras do que as vacinas convencionais, que são aquelas que utilizam organismos vivos atenuados. É o que explicou o Prof. Dr. Vasco Azevedo, Chefe do Laboratório de Genética Celular e Molecular (LGCM) da Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG, em palestra realizada no VII Congresso Brasileiro de Biossegurança da Associação Nacional de Biossegurança – ANBio, que aconteceu em setembro, em Joinville, SC. Segundo o especialista, também, a técnica das terapias gênicas promete prevenir e tratar diferentes doenças, mesmo as mais graves, com muito mais controle e de forma muito mais dirigida.

"Agora estamos estudando uma nova vacina para tuberculose. Ela utilizará probióticos para transportar um gene da doença que estimulará, com bastante segurança, o organismo humano e, assim, esperamos ter uma eficácia

de quase 100% na prevenção da doença", conta o professor. Para ele, não é possível afirmar que as vacinas, de maneira geral, são capazes de prevenir totalmente o ser humano. "Sabemos que as vacinas convencionais possuem eficácia que gira em torno de 80% e 90%. O que podemos comemorar é que as opções geneticamente modificadas podem apresentar uma eficácia quase que total".

Azevedo destaca que as vacinas transgênicas trazem, por si só, uma tecnologia nunca antes vista e que possibilitam usar o próprio gene da doença a favor do homem. "Hoje já temos grandes experimentos para prevenção do câncer, hepatites, AIDS, malária e outras doenças que, antigamente, nem imaginávamos que pudéssemos prevenir", certifica. Ele salienta, porém, que ainda é necessário fazer muitos estudos para que, em um futuro palpável, seja possível evitar doenças graves e que, hoje, são responsáveis pela morte de milhões de pessoas.