

Planejamento baseado na estrutura do receptor e do ligante de novos modulares da beta-tubulina candidatos a fármacos na terapia do câncer

Pesquisador responsável: [Adriano Defini Andricopulo](#)



Beneficiário: [Adriano Defini Andricopulo](#)



Instituição-sede da pesquisa: [Instituto de Física de São Carlos \(IFSC\). Universidade de São Paulo \(USP\). São Carlos, SP, Brasil](#)

Área do conhecimento: [Ciências Biológicas](#) - [Biofísica](#) - [Biofísica Molecular](#)

Linha de fomento: [Auxílio à Pesquisa - Regular](#)

Processo: 07/07128-1

Vigência: 01 de junho de 2008 - 31 de maio de 2010

Assunto(s): [Planejamento de fármacos](#)

Resumo

Câncer é a denominação para um grupo de doenças devastadoras caracterizadas pelo crescimento e multiplicação descontrolados de células anormais, que são capazes de invadir estruturas próximas e se espalham em diversas regiões do organismo. Estas células malignas deixam de responder aos mecanismos de controle e defesa do organismo, duplicando-se continuamente e desordenadamente para criar os tumores. De acordo com dados do Instituto Nacional de Câncer (INCA), cerca de 600 mil novos casos de câncer são diagnosticados somente no Brasil a cada ano. Os diversos tipos de câncer representam a segunda maior causa de morte no país, panorama grave que acompanha uma tendência mundial. A alteração freqüente no ciclo das células tumorais tem levado à identificação da interferência com a função do fuso mitótico como uma etapa importante para o planejamento de novos fármacos para a terapia do câncer. A tubulina, proteína constitutiva dos microtúbulos, é a única proteína relacionada a esse processo que é alvo de agentes terapêuticos - taxol, taxotere, vincristina e vimblastina - clinicamente aprovados para o tratamento de diversos tipos de câncer. Entretanto, o desenvolvimento de resistência, o aparecimento de reações adversas e a baixa solubilidade dos taxanos têm impulsionado a pesquisa por novas entidades químicas com propriedades terapêuticas otimizadas. O presente projeto de pesquisa visa o desenvolvimento de novos ligantes da beta-tubulina candidatos a novos fármacos na terapia do câncer, através do planejamento em química medicinal, síntese orgânica planejada, avaliação biológica e estudos de modelagem molecular. Os estudos propostos neste projeto envolvem o uso de técnicas de planejamento baseado na estrutura do receptor (SBDD) e planejamento baseado na estrutura do ligante (LBDD), através da integração de métodos computacionais e experimentais avançados. (AU)

CDi/FAPESP - Centro de Documentação e Informação da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo

R. Pio XI, 1500 - Alto da Lapa - CEP 05468-901 - São Paulo/SP - Brasil
cdi@fapesp.br - [Converse com a FAPESP](#)