

Estudo de Caso | Universidade Federal do Amapá

# A introdução do CDDI em Ensino e Pesquisa na Universidade Federal do Amapá

## Professora Dra Lorane Hage Melim - formação e carreira

A professora Dra Lorane Hage Melim é amapaense, formada em Farmácia em 2002 pela CESUPA (Centro Universitário do Pará). Fez seu doutorado direto na USP, em Ribeirão Preto. Seu foco do doutorado, concluído em 2009, foi com peçonhas de serpentes, em toxinologia, já com aplicação de ferramentas computacionais. A Professora Lorane trabalha desde seu doutorado com ferramentas *in silico*.

Em 2013, se tornou docente da Universidade Federal do Amapá (UNIFAP), lecionando nos programas de pós-graduação em Ciências Farmacêuticas no nível de mestrado, e em Inovação Farmacêutica no nível de doutorado, trabalhando com estudo *in silico* em modelos de alvos farmacológicos para Doença de Parkinson e Alzheimer, e também faz bioprospecção de produtos naturais para estas patologias.

## **A adoção do CDDI e seu impacto no Ensino e Pesquisa**

Para a professora Lorane, as ferramentas de modelagem *in silico* são essenciais para sua pesquisa. O uso destas ferramentas é diário para o planejamento computacional de novos medicamentos. Por estar em uma universidade pública, ela opta com frequência por ferramentas de *open access*. Há 3 meses, ela adotou o Cortellis Drug Discovery Intelligence™, CDDI, o considerou uma boa evolução do Integrity, com uma interface gráfica mais interessante, mais atrativa e com recursos mais intuitivos. Segundo ela, em pouco tempo é possível navegar na ferramenta com bastante facilidade. Em sua disciplina de Metodologia Científica ela tem mostrado o CDDI como uma importante ferramenta de pesquisa que traz resultados robustos e confiáveis. Muitas vezes, ela conseguiu comprovar com o CDDI os resultados que os alunos obtiveram nos cálculos teóricos, permitindo verificar que cada molécula tem um grupo funcional essencial para sua atividade farmacológica. Este tipo de abordagem, permite solidificar o conhecimento teórico obtido em sala de aula. Adicionalmente, ela usa a o CDDI para

análise de ADME (Absorção, Distribuição, Metabolismo e Excreção). Uma vantagem dessa solução é a sua capacidade de seletividade e especificidade de recuperação de informações, trazendo economia de tempo e recursos financeiros para o pesquisador através da priorização de ensaios que serão realizados na bancada do laboratório.

## **Entrevista**

### **Quais as vantagens do CDDI em relação ao Integrity?**

O CDDI é mais intuitivo que o Integrity. Facilitou bastante o uso da ferramenta na busca de alvos farmacológicos e para a predição de atividade biológica. A vantagem é que é possível ter uma visão abrangente do estado-da-arte, pois ele traz também informações sobre outras áreas de conhecimento, inclusive sobre patentes.

### **Como inicia suas buscas na plataforma?**

Geralmente inicio pela estrutura química , e também pela busca de alvos moleculares.



### **Qual o maior desafio para busca da Informação?**

A existência de grande quantidade de informação constitui uma barreira. Trato deste tema com meus alunos. Até que ponto a quantidade de informação é mais importante que a qualidade da informação? Deve haver um balanço entre a quantidade de informação e a precisão de informação.

### **Como você utiliza o CDDI no Ensino?**

No ensino e particularmente na pós-graduação, eu apresento a ferramenta para os alunos de todas as áreas de Pesquisa (Química Medicinal, Síntese Química, Farmacologia Experimental, etc). Neste caso, minha função é apresentar todas as ferramentas possíveis, e este ano estou apresentando o CDDI também. Vamos usar agora a área de conhecimento de Síntese Orgânica do CDDI para planejamento de análogos farmacológicos.

### **Poderia comentar um caso emblemático do uso do CDDI em sua prática?**

Um divisor de águas foi a obtenção de informações de patentes sobre os estudos que realizo. A existência destas patentes norteou a importância da pesquisa que estamos realizando. Além disso, a visão abrangente sobre o estado-da-arte das moléculas que estudamos é muito importante. Por exemplo, com o CDDI foi possível priorizar algumas moléculas pela viabilidade de sua obtenção sintética.

### **O apoio da Clarivate foi importante para o uso do CDDI?**

Sim, é fundamental receber os treinamentos, pois o tempo do pesquisador é bastante exíguo, e às vezes não conseguimos tempo

para explorar os recursos das ferramentas. Quando vocês fizeram o treinamento, ficou claro a utilidade para os docentes e alunos.

### **Por que você recomendaria o CDDI a outros docentes e alunos?**

Eu recomendo o CDDI por ser uma ferramenta robusta, com qualidade de informação, de fácil uso, e bastante assertiva. Estes são os valores imprescindíveis para a pesquisa: robustez, facilidade de uso, economia de recursos e assertividade.

Hoje uso o CDDI na disciplina de Metodologia Científica com os alunos de áreas de conhecimento diferentes, tais como Síntese, Farmacologia Experimental, Química Medicinal, etc. A integração de informações do CDDI é bastante importante também, pois permite uma visão abrangente. Por exemplo, ao explorar rotas de síntese, eu consigo também fazer busca de informações ao mesmo tempo sobre a farmacocinética.

### **O CDDI é hoje uma ferramenta estratégica?**

Sim, com certeza, vejo utilidade dela em todas etapas de nossas pesquisas.

### **O CDDI pode auxiliar na retenção de alunos na carreira acadêmica? Já ouvimos de outros professores de Universidades Federais, que o CDDI é importante para a atividade científica e publicação de artigos.**

Eu acredito que sim, toda ferramenta que possa trazer subsídios para o desenvolvimento do aprendizado, pode sim ser importante, embora ainda não tenha essa percepção por conta da adoção recente do CDDI. E com o uso do CDDI e outras ferramentas, conseguimos continuar com

as pesquisas mesmo com a pandemia e o funcionamento parcial da UNIFAP.

**É importante o apoio da CAPES para disponibilizar o CDDI aos docentes e alunos?**

A manutenção do Integrity e futuramente do CDDI pela CAPES é essencial para os pesquisadores e docentes da minha área. Nesse sentido, é mais que importante: é essencial. Em Química Medicinal, uma característica importante do fármaco apenas vai modular o grau de atividade farmacológica, enquanto uma característica essencial faz com que sua ausência torne o fármaco totalmente inativo. Fazendo um paralelo com a Química Medicinal, o CDDI é essencial hoje para nossas atividades de Ensino e Pesquisa. Esta parceria tem que continuar sim.

**Nota:** O Cortellis Drug Discovery Intelligence é a versão aprimorada do Integrity, e para ter acesso basta entrar em contato com a equipe da Clarivate (contatos no final do Case Study). O Integrity pode ser acessado através do site do Portal de Periódicos da Capes, na aba BUSCAR BASE.

**O que mudou com a adoção do CDDI na UNIFAP?**

Hoje acredito que apenas eu esteja usando a ferramenta CDDI, mas com certeza ela precisa ser melhor divulgada, e aí sim veremos o impacto dela em outras disciplinas, mas por minha experiência, a ferramenta tem agilizado a obtenção de informações iniciais para a pesquisa. Acredito que outras disciplinas também serão beneficiadas pelas características de integração de dados de várias áreas do conhecimento diferentes do CDDI, de uma maneira confiável.

**O CDDI está envolvido em alguma inovação na UNIFAP em serviços e ou produtos?**

Atualmente não. Usamos o Cortellis Drug Discovery Intelligence™, em um programa de doutorado de Inovação Farmacêutica, então implicitamente acredito que sim haverá impactos da ferramenta nas pesquisas que estão sendo conduzidas, principalmente nas que envolvem a síntese de fármacos.



## Sobre a Clarivate

Clarivate™ é líder global no fornecimento de soluções para acelerar o ciclo de vida da inovação. Nossa missão ousada é ajudar os clientes a resolver alguns dos problemas mais complexos do mundo, fornecendo informações estratégicas e insights que reduzem o tempo de conversão de novas ideias em invenções transformadoras nas áreas da ciência e propriedade intelectual. Ajudamos os clientes a descobrir, proteger e comercializar suas invenções através de soluções confiáveis baseadas em tecnologia, juntamente com a nossa profunda experiência. Para obter mais informações, visite [clarivate.com](https://clarivate.com).

Para mais informações e agendamento de treinamentos entre em contato:

**Sérgio Delarcina**  
**Regional Sales Consultant**  
**[sergio.delarcina@clarivate.com](mailto:sergio.delarcina@clarivate.com)**  
**+55 11 99513 0688**