

A cafeína é um dos principais alcalóides de plantas consumido mundialmente. Dentre suas propriedades farmacológicas mais conhecidas estão a vasodilatação e o estímulo do sistema nervoso central. Entretanto, a sua influência no ciclo celular e no reparo de DNA é controversa e pouco entendida. Assim, esse estudo visa obter dados interatomicos sobre a atuação da cafeína com os mecanismos de reparação de DNA, o ciclo celular e a apoptose usando ferramentas da biologia de sistemas. Neste sentido, os principais programas aplicados foram STITCH 2 (<http://stitch.embl.de/>), STRING 8.2 (<http://string.embl.de/>), iHOP (<http://www.ihop-net.org/UniPub/iHOP/>), e GeneCards (<http://www.genecards.org/>). As relações interatomicas obtidas possibilitaram a criação de uma rede de interações físicas entre proteínas e composto (PPPCI) por meio do software Cytoscape 2.6.3 (<http://www.cytoscape.org/>). Foram usados os *plug-ins* Biological Network Gene Ontology (BiNGO 2.3) e Molecular Complex Detection (MCODE) para ontologia dos genes e análise de clusters. Os dados revelaram que a cafeína age sobre uma rede composta por proteínas que atuam como *hubs* em diferentes processos biológicos, inibindo os pontos de paradas do ciclo celular e a reparação de DNA e, posteriormente, induzindo a célula à apoptose. Além disto, os dados interatomicos mostram que a cafeína possui um forte potencial antitumoral em células que possuem os pontos de parada do ciclo celular e a apoptose funcionais, servindo como modelo para a busca de outros compostos que possuam atividade farmacológica semelhante.