

Desenvolvimento de uma base de dados de Produtos Naturais da biodiversidade Brasileira.

Marilia Valli¹ (PG)*, Ricardo N. dos Santos² (PG), Leandro D. Figueira¹ (TM), Cíntia H. Nakajima¹ (IC), Ian Castro-Gamboa¹ (PQ), Adriano D. Andricopulo² (PQ), Vanderlan S. Bolzani¹ (PQ)

*mariliava@gmail.com

¹Núcleo de Bioensaios, Blossíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais (NuBBE), Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, UNESP - Univ. Estadual Paulista, 14801-970, Araraquara-SP

²Laboratório de Química Medicinal e Computacional (LQMC), Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo (USP), 13560-970, São Carlos-SP

Palavras Chave: produtos naturais, base de dados.

Introdução

Os produtos naturais são uma excelente fonte de inspiração para o desenvolvimento de novos fármacos.¹ O Brasil possui uma biodiversidade extremamente rica, que vem sendo estudada por diversos grupos de pesquisa brasileiros. Um deles é o Núcleo de Bioensaios, Blossíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais (NuBBE), que vem pesquisando, ao longo de 15 anos, substâncias bioativas de plantas e fungos endofíticos de espécies de Cerrado e Mata Atlântica. A informação química gerada sobre a biodiversidade brasileira durante anos de estudos é valiosa mas, bastante fragmentada e, portanto, de difícil acesso. Devido a ausência da informação organizada numa base de dados sobre os produtos naturais da biodiversidade brasileira, descrevemos aqui o desenvolvimento de uma base de dados de fácil acesso, disponível na internet e de acesso livre chamada NuBBE Database (NuBBE_{DB}).²

Resultados e Discussão

A NuBBE_{DB} contém os produtos naturais e derivados estudados pelo Núcleo de Pesquisa NuBBE, já publicados em 170 artigos científicos. Atualmente a base de dados possui 640 compostos, sendo continuamente atualizada. NuBBE_{DB} disponibiliza uma variedade de informações para cada substância natural (Fig. 1), <http://nubbe.iq.unesp.br/nubbeDB.html>.

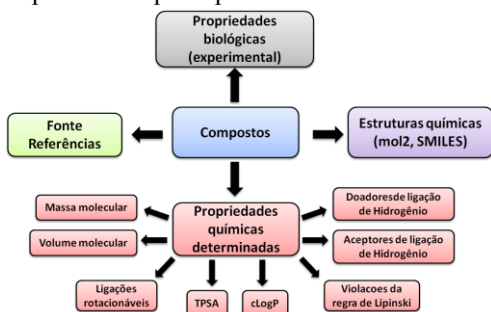


Figura 1. informações disponíveis para cada metabólito secundário.

Para buscar os compostos na base de dados uma ferramenta de busca permite a verificação das propriedades físico-químicas, farmacológicas, estrutura

química, ocorrência, ou uma combinação desses critérios (Fig. 2).

Figura 2. Ferramentas de busca.

Um estudo envolvendo as propriedades dos compostos permitiu acessar de maneira geral a grande diversidade química e as propriedades farmacológicas de cada estrutura molecular.

Detalhes estatísticos das propriedades enumeradas para as substâncias armazenadas na base serão apresentados durante o evento científico.

Conclusões

A Base NuBBE_{DB} já está disponível e espera-se que possa ser uma ferramenta útil para estudos de química medicinal sobre produtos naturais da biodiversidade brasileira, além da compilação de dados para estudos de desrepliação, metabolômica, biologia molecular e ecologia. A meta é que a NuBBE_{DB} seja o ponto de partida para catalogar toda a informação química da biodiversidade brasileira. Um *Cross-linking* com a base ZINC (<http://zinc.docking.org/>), sediada no Department of Pharmaceutical Chemistry da University of California, San Francisco (UCSF) com a NuBBE_{DB} já foi solicitada, demonstrando o valor dos dados armazenados. O interesse da base ZINC, uma das maiores do mundo com mais de 21 milhões de compostos *ready-to-dock* e em format 3D demonstram a importância deste trabalho sobre a química de produtos naturais do Brasil.

Agradecimentos

FAPESP, CAPES, CNPq e Molispiration.

¹Newman, D.J.; Cragg, G.M. *J. Nat. Prod.* **2012**, 75, 311.

²Valli, M; dos Santos, R.N; Figueira, L.D.; Nakajima, C.H; Castro-Gamboa, I.; Andricopulo, A.D.; Bolzani, V.S. *J. Nat. Prod.* **2013**, ASAP.