

SISTEMAT X – Uma ferramenta para a química de produtos naturais para estudos quimiotaxonômicos e de bioprospecção.

Patrick H. G. Azevedo (IC)¹, Ewerton H. S. Raposo (IC)¹, Yugo M. de Alencar (IC)¹, Tiago B. Oliveira (PG)², Ricardo Stefani (PQ)³, Vicente de P. Emerenciano (PQ)⁴, Fernando B. da Costa (PQ)², Marcus T. Scotti (PQ)^{5*}.

*mtscotti@ccae.ufpb.br

1 – Universidade Federal da Paraíba, Departamento de Ciências Exatas, Campus IV;

2 – Universidade de São Paulo, Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, Departamento de Ciências Farmacêuticas, Laboratório de Farmacognosia;

3 – Universidade Federal de Mato Grosso, Instituto de Ciências Exatas e da Terra, Campus Universitário do Araguaia; Universidade Federal da Paraíba, Centro de Ciências da Saúde, Laboratório Micologia do Departamento de Ciências Farmacêuticas;

4 – Universidade de São Paulo, Instituto de Química, Departamento de Química Fundamental;

5 – Universidade Federal da Paraíba, Departamento de Engenharia e Meio Ambiente, Campus IV.

Palavras Chave: banco de dados, metabólitos secundários, quimiotaxonomia, bioprospecção.

Introdução

O sistema especialista SISTEMAT¹ foi desenvolvido por um grupo de pesquisadores brasileiros para auxiliar na elucidação estrutural de produtos naturais utilizando, especialmente, dados de RMN ¹³C. Entre os resultados fornecidos pelo sistema, os fragmentos estruturais e o provável esqueleto da estrutura são frequentemente apresentados com elevados índices de acerto. O sistema é executado em plataforma WindowsTM ou DOSTM (Microsoft). Foi concebido originalmente em linguagem FORTRAN e depois em PASCAL a fim de melhorar a interface com o usuário. O SISTEMAT X, cujo significado é "SISTEMAT eXtended", está sendo desenvolvido como parte de um esforço para dotar o SISTEMAT de uma nova interface multiplataforma (WindowsTM, Mac OS, Linux) e muitas novas funções. Dentre elas, destaca-se a capacidade de gerenciar bancos maiores, ferramentas de busca por estruturas e novos tipos de exportação de dados. O objetivo seguinte é disponibilizar o sistema para toda a comunidade científica, através de uma interface "Web" que já está em fase de produção.

Resultados e Discussão

O SISTEMAT X tem capacidade de até 4TB de dados. Utiliza interface Java, e está com interface "Web" (Figura 1) em fase de produção. Nos últimos meses foram resolvidos vários problemas relacionados à última versão do SISTEMAT X, tais como: erro no cadastro de ocorrências botânicas; inconsistência no cadastro de "gêneros" de plantas; atualização nas telas de ocorrências. Também foram realizados melhoramentos como atualização da "Java Virtual Machine" no sistema. Foram reparadas as abas de acesso ao sistema, incluindo a remodelagem da estrutura física relacionada aos botões, e instalado um módulo de busca de nomes de substâncias e também o acesso via "Wide Area Network". Este acesso será otimizado

principalmente no desempenho de acesso de dados ao se implantar a interface "Web". Atualmente o SISTEMAT X conta com um banco com cerca de 2000 sesquiterpenos lactonizados da família Asteraceae e 500 alcalóides de Apocynaceae, totalizando mais de 3000 ocorrências botânicas. Estão sendo cadastradas atividades biológicas relacionadas a doenças parasitárias negligenciadas, principalmente frente a tripanossomíases e leishmanioses. Todos estes dados combinados compreendem uma ferramenta poderosa no auxílio do trabalho de bioprospecção. O SISTEMAT X tem módulo de cadastro para diversas propriedades físico-químicas e experimentais, tais como dados de RMN, ponto de fusão, tempos de retenção em cromatografia, dentre outros.



Figura 1. Telas do SISTEMAT X em Java e aplicação WEB.

Conclusões

O SISTEMAT X, um sistema que já é utilizado para diversos estudos publicados pelo grupo de pesquisas e em fase de desenvolvimento para ser disponibilizado à comunidade científica de produtos naturais. Trata-se, portanto, de um enorme banco de dados e inédito no país para a sua finalidade, o qual deverá crescer continuamente, seja no número de dados ou quanto às suas funções.

Agradecimentos

Agradecemos o auxílio financeiro do CNPq.

¹ Gastmans J. P.; Furlan, M.; Lopes M. N.; Borges J. H. G.; Emerenciano V. P. *Quim. Nova*, 1990, 13, 10.