



Relatório das atividades da Divisão de Produtos Naturais durante a 36ª. Reunião Anual da SBQ ocorrida em Águas de Lindóia-SP, entre 25 e 28 de maio de 2013

As atividades realizadas sob a coordenação da Divisão de Produtos Naturais (QPN) da SBQ estão descritas a seguir. Além das atividades programadas pela Divisão, pesquisadores e alunos tiveram a oportunidade de participar de outras atividades relacionadas a Produtos Naturais, integrantes da programação geral da 36ª. RASBQ.

1. Workshop

No dia 25/05/2010, das 10:00h às 17:00h, no Salão Real, foi realizado o *Workshop* intitulado “**Novas fronteiras na identificação, síntese e avaliação de moléculas bioativas**”, organizado pelas Divisões de Produtos Naturais e Química Medicinal. O comitê organizador foi composto pelos diretores de Divisão Marcelo Santos Castilho (MED) e Dulce Helena Siqueira Silva (QPN). A programação foi a seguinte:

10:00h - 10:20h: *Abertura*

Marcelo Santos Castilho (UFBA) e *Dulce Helena Siqueira Silva* (IQAr-UNESP)

10:20-10:40

Desafios e oportunidades envolvidos no planejamento de candidatos a fármacos multi-alvo para a doença de Alzheimer *Claudio Viegas Junior* (UNIFAL)

10:40-11:00

Obtenção e avaliação de substâncias bioativas de plantas da região Meio-Norte do Brasil
Mariana Helena Chaves (UFPI)

11:00-11:20

MIA-QSAR: imagens codificam atividades biológicas *Matheus Puggina Freitas* (UFLA)

11:20-11:40

Novos derivados de produtos naturais bioativos por transformações microbianas
Niege Araçari Jacometti Cardoso Furtado (FCFRP-USP)

11:40-14:00 – *Almoço*

14:00-14:20 - Desafios e oportunidades na predição do metabolismo mediado por citocromo P450 de moléculas candidatas a fármacos *Carolina Horta Andrade* (UFG)

14:20-14:40 - Os desafios do LaDMol-QM na síntese e descoberta de novas moléculas bioativas
Arthur Eugen Kummerle (UFRRJ)

14:40-15:00

Análise estrutural de antibióticos peptídicos através da Ressonância Magnética Nuclear
Luciano Moraes Lião (UFG)

15:00-15:30 – Coffee-break

15:30-16:20 – OIDD - Lilly Open Innovation Drug Discovery program

Maria Alvim-Gaston (Eli-Lilly-USA)

16:20-18:00 – Mesa Redonda - Perspectivas e desafios para o desenvolvimento de moléculas bioativas- *José Daniel Figueroa Villar (IME); Norberto Peoporine Lopes (FCFRP-USP), Fernando Antonio Santos Coelho (UNICAMP)*

As discussões sobre cada uma das apresentações confirmou o reconhecimento do forte impacto do planejamento de fármacos como uma área de interface que depende da integração de conhecimentos oriundos de diferentes áreas da química para seu sucesso. Pesquisadores de diferentes regiões do País mostraram seus esforços individuais para identificar, sintetizar e planejar moléculas protótipos, utilizando para isso técnicas e estratégias modernas de síntese orgânica, quimiometria e caracterização de produtos naturais. As discussões finais pelos integrantes da mesa redonda destacaram novas oportunidades de colaboração e um panorama dos desafios e perspectivas atuais para pesquisas realizadas nesta área.

2. Sessão Coordenada

A Sessão Coordenada ocorreu no dia 26/05, das 13:20h às 17:00h, no Salão Real, cuja programação encontra-se a seguir:

Coordenadora: Mary Ann Foglio (CPQBA-UNICAMP)

13:20 - "Produtos Naturais para o controle de fungos e nematoides fitoparasitas"

Denilson F. de Oliveira (UFLA)

13:50 - Elucidação química da fucomanogalactana isolada do micélio do cogumelo medicinal *Grifola frondosa* ("Maitake")"

Estefânia Viano da Silva (UFG)

14:10 – "Acetogenina isolada de sementes de *Annona coriacea*(Annonaceae) com atividade larvicida frente à *Aedes aegypti*"

Francyne Carmem Santos Correia (UFMT)

14:30 – "Hyptenólídeo, uma nova α -pirona de *Hyptis macrostachys* Benth"

Vicente Carlos de Oliveira Costa (LTF/UFPB)

14:50 – "Obtenção de alcaloides de *Conchocarpus fontanesianus*(A.St.-Hil) Kallunki & Pirani (Rutaceae) por método de extração não convencional e identificação por LC/DAD/EM/EM/ESI+)"

Rodrigo Sant'Ana Cabral (IBOT-SP)

15:10 – INTERVALO

15:20 – "Rastreamento de princípios bioativos por reagentes suportados em polímeros e

monitoramento em tempo real por ATR-FTIR"

Marcelo Sierpe Pedrosa (IFRJ)

15:50 – "Identificação do feromônio sexual de *Chauliognathus* sp. (Coleoptera: Cantharidae)"

Diogo Montes Vidal (UFPR)

16:10 – "Alcalóides quinolactínicos derivados de fungos associados à alga marinha *Dichotomaria marginata* usando LC-PDA-MS e LC-MSn"

Teresinha de Jesus Aguiar dos S. Andrade (IQ-UNESP)

16:30 – "Plantas brasileiras: fonte de metabólitos secundários ativos"

Otilia Deusdenia L. Pessoa (UFC)

Adicionalmente, foi realizada uma Sessão Coordenada conjunta, com as Divisões QPN e MED. que ocorreu no dia 28/05, das 13:00h às 16:40h, no Salão Real, cuja programação encontra-se a seguir:

Coordenador: Ian Castro Gamboa (IQ-UNESP-Araraquara)

13:00 – "Estudos químicos de espécies vegetais brasileiras na busca de compostos com ação citotóxica, anti-inflamatória e anti-parasitária"

João Henrique Ghilardi Lago (DCET – UNIFESP)

13:30 – "Naftoquinonas e um novo cromeno de *Sinningia allagophylla* (Gesneriaceae)"

Dilamara Riva Scharf (UFPR)

13:50 – "Estudos de QSAR 3D (CoMFA e CoMSIA) para um conjunto de inibidores da enzima prostaglandina E2 microsossomal sintetase I (mPGES-1)"

Thamires Quadros Froes (UFBA)

14:10 – "Atividade hipoglicemiante *in vivo* do ácido chicórico, um componente fenólico do extrato aquoso de *Ocimum gratissimum* L. (Lamiaceae)"

Livia Marques Casanova (UFRJ)

14:30 – "Síntese e avaliação de atividade leishmanicida de derivados 1,3-bisariloxi-2-propanol"

Stefânia Neiva Lavorato (UFMG)

14:50 – INTERVALO

15:00 – "Estudo cinético de inibição e modelagem molecular de triazóis glicoconjugados na xx-glicosidase MAL12"

Floriano Paes Silva Junior (FIOCRUZ)

15:30 – "Avaliação da atividade antimalárica de derivados semissintéticos dos alcaloides (–)-cassina e (–)-espectalina isolados de *Senna spectabilis*"

Marcos Pivatto (IQ-UFU)

15:50 – "Aplicação do radiofármaco $[[99\text{mTc}]\text{O}_2(\text{HL91})]$ *in vitro*, *ex vivo* e *in vivo* para localização de regiões de hipóxia em tumores de células B16F10"

Carolina Portela Luz (FMUSP)

16:10 – "Produção sustentável de biossurfactantes de *Bacillus subtilis* e suas aplicações"

Augusto Etchegaray Jr (PUC-Campinas)

3. Assembleia Divisional

A Assembleia ocorreu no dia 27/05, das 21:20h às 22:30h, no Salão Rubi. A pauta constou dos seguintes assuntos:

1. Aprovação da ata da Assembléia da QPN na 35ª RA-SBQ; 2. Comunicações da Mesa, incluindo os itens 2.1. Apresentação das atividades em PN durante a 36ª RA-SBQ e 2.2. Estatísticas da 36ª. RASBQ; 2.3. Premiação de painéis. 3. Ordem do dia: 3.1. Aprovação do relatório de atividades da QPN na 35ª. RASBQ; 3.2. Indicação e Aprovação da Comissão para elaboração das normas para a outorga da Medalha Otto Richard Gottlieb para pesquisadores atuantes em Química de Produtos Naturais, bem como da Comissão de Avaliação a candidaturas a Medalha Otto Richard Gottlieb; 3.3. Apresentação de candidaturas da comissão organizadora do 5th BCNP/ XXX RESEM; 3.4. Aprovação da candidatura da comissão organizadora do 5th BCNP; 3.5. Sugestões de atividades da QPN para a 37ª RASBQ; 4. Informes Gerais.

As comunicações da Mesa incluíram a descrição das atividades da Divisão de Produtos Naturais na durante a 36ª RA-SBQ; Estatísticas da 36ª RASBQ; comentários sobre a Home Page da QPN-SBQ; e, por fim, o relato das atividades desenvolvidas durante o ano pela Divisão de Produtos Naturais e propostas de atividades para a 37ª. RASBQ, a ser realizada em 2014.

Sobre a Home Page da QPN-SBQ, a mesa reafirmou o compromisso da Diretoria em mantê-la atualizada, lembrando que arquivos de interesse aos sócios da Divisão continuam disponibilizados na página, como notícias, eventos, *links* etc.; lista de periódicos selecionados em PN com seus respectivos fatores de impacto; listagem de sócios da Divisão de PN (por regiões do país); Relatórios, atas e documentos de interesse aos associados.

Dentre as atividades realizadas durante a 36ª. RASBQ, mereceram destaque e discussão as seguintes:

1. Workshop : “Novas fronteiras na identificação, síntese e avaliação de moléculas bioativas”, organizado pelas Divisões de Produtos Naturais e Química Medicinal, contribuindo para maior integração das Divisões.

2. Mini-curso “Biocatálise”, realizado nos dias 26, 27 e 28/05, e ministrado pela Profa. Dra. Cintia Duarte de Freitas Milagre (UNESP - Araraquara), que abordou tópicos relevantes associados a biotecnologia, biotransformações, biocatálise, biorremediação, biodegradação e química verde, além de Imobilização de células e enzimas microbianas, Utilização de meios não convencionais como líquidos iônicos ou CO₂ supercrítico para as reações de biotransformação, Miniaturização dos ensaios visando redução da geração de resíduos, dentre outros.

3. Sessões de painéis nos dias nos dias 26/05 (PN 001-050), 27/05 (PN 51-100), e 28/05/2013 (PN 101-143), sobre o que novamente foi sugerida a alteração no horário da última sessão de painéis, para evitar seu esvaziamento e possibilidade de identificação dos painéis premiados durante a Assembleia Geral, o que teve importância destacada para os alunos nas edições anteriores da RASBQ.

4. Sessão Coordenada, nos dias 26 e 28/05, cujas programações incluíram a apresentação de 03 mini-conferências (30 min.), e 06 apresentações de alunos/pesquisadores (20 min. cada) em nível de IC, PG ou Pós-doc, sendo que uma delas foi realizada em conjunto com a divisão MED. Diversos associados manifestaram-se sobre a alta qualidade dos trabalhos e bom preparo dos apresentadores, proporcionando momentos de discussão sobre temas atrativos em QPN, o que enriqueceu a Sessão Coordenada;

5. Conferência Plenária “Evolução química sem fronteiras em Angiospermas basais”, proferida pelo Prof. Dr. Massuo Jorge Kato (IQUSP – São Paulo), em que foi destacado o potencial da Química de Produtos Naturais em estudos de bioprospecção, ecologia e evolução, como mostra seu resumo:

Para a 37ª. RASBQ, a ser realizada em 2014, foi sugerida a dedicação das 02 Sessões coordenadas a que tem direito a Divisão QPN, à apresentação de trabalhos da área, para que seja possível um panorama mais detalhado das potencialidades dos grupos atuantes em PN no Brasil.

4. Conferência Plenária

A conferência intitulada “**Evolução química sem fronteiras em Angiospermas basais**” foi proferida pelo Prof. Dr. Massuo Jorge Kato (IQUSP – São Paulo) e ocorreu no dia 27/05, às 14:40h, no Salão Ágata II. Na conferência, o Prof. Massuo destacou o potencial da Química de Produtos Naturais em estudos de bioprospecção, ecologia e evolução, como mostra seu resumo:

A exploração do potencial da química de produtos naturais constitui-se num grande desafio para o país em função do tamanho de sua biodiversidade. Os produtos naturais, se adequadamente explorados, podem representar uma importante fonte de divisas para o país. Tem-se a expectativa de que projetos envolvendo bioprospecção sistemática em Unidades de Conservação estejam em vias de serem implementados. Entretanto, o conhecimento básico deve igualmente fazer parte dos desafios tecnológicos para a produção de produtos naturais e gerar riquezas, mas também descrever fatores que contribuem para a imensa diversidade molecular em plantas. As espécies propostas, como modelo para tal investigação, são pertencentes às espécies basais de Angiospermas em função da diversidade de espécies e complexidade das relações com a biota associada. A descrição desses sistemas complexos requer a integração de estudos de conservação de germoplasma, ecologia, química, bioatividade bem como os estudos evolutivos como modelo para investigar a biodiversidade nos trópicos.

5. Mini-Curso

O Mini-curso intitulado “**Biocatálise**” foi realizado nos dias 26, 27 e 28/05, na Sala 8 do Hotel Monte Real, das 8:00h às 10:00h, para pós-graduandos, professores de 1º e 2º grau e graduandos. A ministrante, Profa. Dra. Cintia Duarte de Freitas Milagre (UNESP - Araraquara), abordou os seguintes tópicos, como programa do mini-curso:

1. Introdução sobre os conceitos de biotecnologia, biotransformações, biocatálise, biorremediação, biodegradação e química verde. Diferença entre biotransformações/biocatálise e fermentações.
2. Fontes de biocatalisadores e Triagens enzimáticas de alta eficiência: métodos de seleção de enzimas microbianas para reações de biotransformações e biocatálise através de ensaios enzimáticos de alta performance. Miniaturização dos ensaios: redução da geração de resíduos.
3. Imobilização de células e enzimas microbianas.
4. Utilização de meios não convencionais (líquidos iônicos, CO₂ supercrítico) para as reações de biotransformação.
5. Processos industriais em andamento e que envolvem biotransformações e biocatálise na obtenção dos produtos.

6. Sessão de Painéis

A Divisão de Produtos Naturais recebeu 153 resumos para avaliação. Um total de 332 avaliações foram realizadas por 74 pareceristas *ad hoc*, sendo que 143 resumos foram aprovados para serem apresentados na forma de painéis.

A apresentação dos painéis aprovados ocorreu em três sessões: nos dias 26/05 (PN 001-050), das 17h10 às 20h10, 27/05 (PN 51-100), das 17h20 às 20h20, e 28/05/2013 (PN 101-143), das 16:50h às 19:50h.

7. Premiação de Painéis

Foram selecionados dois painéis para receberem a premiação da SBQ. A avaliação dos painéis foi realizada pelos participantes do congresso que optaram, no momento da inscrição, para esta atividade. A seleção dos melhores painéis foi realizada através de votos depositados nas urnas disponíveis na entrada do local de apresentação dos painéis.

Os dois painéis premiados encontram-se listados a seguir:

QPN-059 - Prospecção sazonal do perfil de polifenóis e campferitrina em folhas de pata-de-vaca (Bauhinia forficata) coletadas em diferentes localidades.

Autores: Costa, J. O. (IC); Melo, V. F. (IC); Valente, L. M. M. (PQ); Siani, A. C. (PQ); Monteiro, S. S. (PQ); Tostes, J. B. F. (PQ) - UFRJ.

QPN-069 - Micropartículas de ligninas aplicadas na formulação e fotoestabilização do bioinseticida Azadirachta indica.

Autores: Costa, E. S. (PG); Ferreira, E. N. (IC); Silva da, M. F. G. F. (PQ); Fernandes, J. B. (PQ); Vieira, P. C. (PQ); Forim, M. R. (PQ) – UFSCar.

Águas de Lindóia, 29 de maio de 2013.

Dulce Helena Siqueira Silva (IQ-UNESP-Araraquara)
Diretora

Maria Goretti V. Silva (UFC)
Vice-diretora

Valdir Florencio Veiga Jr (UFAM)
Tesoureiro