

CIBFar - Centro de Inovação em Biodiversidade e Fármacos

Pesquisador responsável: [Glaucius Oliva](#)   

Beneficiário: [Glaucius Oliva](#)   

Instituição-sede da pesquisa: [Instituto de Física de São Carlos \(IFSC\), Universidade de São Paulo \(USP\), São Carlos, SP, Brasil](#)

Pesquisadores principais: [Carlos Roque Duarte Correia](#) ; [Vanderlan da Silva Bolzani](#) ; [Maysa Furlan](#) ; [Leila Maria Beltrami](#) ; [Luiz Carlos Dias](#) ; [Adriano Defini Andricopulo](#) ; [Fernando Antonio Santos Coelho](#) ; [Paulo César Vieira](#)

Área do conhecimento: [Ciências Biológicas](#) - [Biofísica](#)

Linha de fomento: [Auxílio à Pesquisa - Centros de Pesquisa, Inovação e Difusão - CEPIDs](#)

Processo: 13/07600-3

Vigência: 01 de julho de 2013 - 30 de junho de 2018

Auxílios(s) vinculado(s): [15/08181-0 - American Society of Pharmacognosy 2015 Annual Meeting](#), AR.EXT
[15/14968-2 - American Society of Pharmacognosy 2015 Annual Meeting](#), AR.EXT
[15/06751-3 - Antitrypanosomal Acetylene fatty acid Derivatives from the Seeds of Porcelia macrocarpa \(Annonaceae\)](#), PUB.ART
[+ mais auxílios vinculados](#)

Bolsa(s) vinculada(s): [15/11339-4 - Análise comparativa de alquilresorcinóis em cultivares de cana-de-açúcar e avaliação de eventual efeito protetor frente a patógenos fúngicos](#), BP.IC
[14/26313-8 - Descoberta e planejamento de inibidores de enolase de Plasmodium Falciparum como novos agentes antimaláricos](#), BP.PD
[14/15145-7 - Estudos estruturais da enzima Topoisomerase II mitocondrial de tripano ssomatóideos](#), BP.PD
[+ mais bolsas vinculadas](#)

Assunto(s): [Biodiversidade](#) [Planejamento de fármacos](#) [Fármacos](#) [Produtos naturais](#) [Síntese orgânica](#) [Bioensaio](#)

Resumo

O Centro de Inovação em Biodiversidade e Fármacos (CIBFar) é uma iniciativa resultante de projetos de pesquisa colaborativos, envolvendo: (i) Laboratório de Química Medicinal e Computacional (LQMC) e Biofísica Molecular - IFSC - USP, (ii) Núcleo de Bioensaios, Biossíntese e Eco Fisiologia de Produtos Naturais (NUBBE) – IQ - UNESP, (iii) Laboratórios de Síntese Orgânica - IQ - UNICAMP, (iv) Laboratórios de Produtos Naturais e Síntese Orgânica - DQ - UFSCar, e (v) Laboratório de Produtos Naturais - FCFRP - USP. O objetivo principal desse Centro é a realização de ciência básica e aplicada, bem como o desenvolvimento tecnológico em todas as áreas de biodiversidade e de descoberta de fármacos com base em pesquisas que utilizam o estado da arte da química de produtos naturais, química orgânica sintética, biologia molecular e estrutural, bioquímica, química medicinal, planejamento de fármacos e ensaios farmacológicos. Os objetivos específicos são a bioprospecção da flora brasileira para a identificação de compostos com um amplo espectro de atividades biológicas (antiparasitária, antibacteriana, anticâncer); seleção de compostos bioativos promissores para síntese orgânica e estudos das relações entre a estrutura e atividade (SAR, QSAR); uso de estratégias de planejamento de fármacos baseado na estrutura do receptor e do ligante (SBDD e LBDD, respectivamente); abordagens para otimização de compostos-líderes; estudos pré-clínicos in vitro e in vivo para a avaliação e otimização de compostos-líderes, e estudos de toxicologia e farmacocinética. O objetivo final é o desenvolvimento de novos candidatos a fármacos com elevado potencial de inovação para desenvolvimento clínico. Para tanto, o CIBFar se baseia não apenas nas competências

e conhecimentos científicos sólidos em todas as áreas de interesse, mas também em uma estrutura organizada para a integração das abordagens modernas em biodiversidade e descoberta de fármacos. O CIBFar tem como principal característica a infraestrutura bem estabelecida em termos de competências para o apoio técnico, financeiro, educação tecnológica e gestão executiva (adquirida nos últimos 11 anos como um dos CEPID-FAPESP). A integração máxima com o setor produtivo será realizada para identificação de oportunidades e definição de metas. No aspecto educacional, o Centro conta com a significativa experiência adquirida ao longo de uma década, em educação e disseminação do conhecimento realizada no CEPID-FAPESP. (AU)

Matéria(s) publicada(s) na Revista Pesquisa FAPESP sobre o auxílio:

[Estruturas promissoras](#)

PUBLICAÇÕES CIENTÍFICAS (25)

(Referências obtidas automaticamente do Web of Science e do SciELO, por meio da informação sobre o financiamento pela FAPESP e o número do processo correspondente, incluída na publicação pelos autores)

ARDILA, JORGE ARMANDO; FUNARI, CRISTIANO SOLEO; ANDRADE, ANDRE MARQUES; CAVALHEIRO, ALBERTO JOSE; CARNEIRO, RENATO LAJARIM. [Cluster analysis of commercial samples of Bauhinia spp. using HPLC-UV/PDA and MCR-ALS/PCA without peak alignment procedure.](#) *Phytochemical Analysis*, v. 26, n. 5, p. 367-373, SEP-OCT 2015. Citações Web of Science: 0.

MONTEIRO, AFIF F.; BATISTA, JR., JOAO M.; MACHADO, MICHELLE A.; SEVERINO, RICHELLE P.; BLANCH, EWAN W.; BOLZANI, VANDERLAN S.; VIEIRA, PAULO C.; SEVERINO, VANESSA G. P. [Structure and Absolute Configuration of Diterpenoids from Hymenaea stigonocarpa.](#) *Journal of Natural Products*, v. 78, n. 6, p. 1451-1455, JUN 2015. Citações Web of Science: 0.

ZEOLY, LUCAS A.; BARCELOS, ROSIMEIRE C.; RODRIGUES, JR., MANOEL T.; GOMES, RALPH C.; COELHO, FERNANDO. [An improved method for the regioselective synthesis of highly substituted quinolines from Morita-Baylis-Hillman adducts.](#) *Tetrahedron Letters*, v. 56, n. 22, p. 2871-2874, MAY 27 2015. Citações Web of Science: 0.

VALLI, MARILIA; BETTI, ANDRESA HEEMANN; DANUELLO, AMANDA; PIVATTO, MARCOS; CENTURIAO, FERNANDA; ANTONIO, CAMILA BOQUE; KUZE RATES, STELA MARIS; BOLZANI, VANDERLAN DA SILVA. [Pyridinic analog of the natural product \(-\)-spectaline as potential adjuvant for the treatment of central nervous system disorders.](#) *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, v. 25, n. 10, p. 2247-2250, MAY 15 2015. Citações Web of Science: 0.

FUNARI, CRISTIANO SOLEO; CARNEIRO, RENATO LAJARIM; KHANDAGALE, MANISH M.; CAVALHEIRO, ALBERTO JOSE; HILDER, EMILY F. [Acetone as a greener alternative to acetonitrile in liquid chromatographic fingerprinting.](#) *JOURNAL OF SEPARATION SCIENCE*, v. 38, n. 9, p. 1458-1465, MAY 2015. Citações Web of Science: 0.

TEODORO, BRUNO V. M.; CORREIA, JOSE TIAGO M.; COELHO, FERNANDO. [Selective Hydrogenation of Indolizines: An Expedient Approach To Derive Tetrahydroindolizines and Indolizidines from Morita-Baylis-Hillman Adducts.](#) *Journal of Organic Chemistry*, v. 80, n. 5, p. 2529-2538, MAR 6 2015. Citações Web of Science: 2.

PINTO, MERI EMILI F.; BATISTA, JR., JOAO M.; KOEHBACH, JOHANNES; GAUR, PRATIBHA; SHARMA, ABHINAY; NAKABASHI, MYNA; CILLI, EDUARDO MAFFUD; GIESEL, GUILHERME M.; VERLI, HUGO; GRUBER, CHRISTIAN W.; BLANCH, EWAN W.; TAVARES, JOSEAM F.; DA SILVA, MARCELO S.; GARCIA, CELIA R. S.; BOLZANI, VANDERLAN S. [Ribifolin, an Orbitide from Jatropha ribifolia, and Its Potential Antimalarial Activity.](#) *Journal of Natural Products*, v. 78, n. 3, p. 374-380, MAR 2015. Citações Web of Science: 0.

BATISTA, JR., JOAO M.; BLANCH, EWAN W.; BOLZANI, VANDERLAN DA SILVA. [Recent advances in the use of vibrational chiroptical spectroscopic methods for stereochemical characterization of natural](#)

[products](#). **NATURAL PRODUCT REPORTS**, v. 32, n. 9, p. 1280-1302, 2015. Citações Web of Science: 0.

DIAS, L. C.; KUROISHI, P. K.; DE LUCCA, JR., E. C. [The total synthesis of \(-\)-cryptocaryol A](#). **ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY**, v. 13, n. 12, p. 3575-3584, 2015. Citações Web of Science: 0.

FERREIRA, LEONARDO G.; ANDRICOPULO, ADRIANO D. [Fragment-Based QSAR and Structural Analysis of a Series of Hydroxyethylamine Derivatives as HIV-1 Protease Inhibitors](#). **COMBINATORIAL CHEMISTRY & HIGH THROUGHPUT SCREENING**, v. 18, n. 5, p. 464-475, 2015. Citações Web of Science: 0.

FERREIRA, LEONARDO G.; OLIVA, GLAUCIUS; ANDRICOPULO, ADRIANO D. [Target-based molecular modeling strategies for schistosomiasis drug discovery](#). **Future Medicinal Chemistry**, v. 7, n. 6, p. 753-764, 2015. Citações Web of Science: 0.

VENTURINI, DIEGO; PASTRELLO, BRUNA; ZERAIK, MARIA LUIZA; PAULI, IVANI; ANDRICOPULO, ADRIANO DEFINI; SILVA-FILHO, LUIZ CARLOS; BOLZANI, V. S.; MORGON, NELSON HENRIQUE; DA SOUZA, A. R.; XIMENES, VALDECIR FARIAS. [Experimental, DFT and docking simulations of the binding of diapocynin to human serum albumin: induced circular dichroism](#). **RSC ADVANCES**, v. 5, n. 76, p. 62220-62228, 2015. Citações Web of Science: 0.

CHAPLA, VANESSA MARA; ZERAIK, MARIA LUIZA; LEPTOKARYDIS, IOANIS HCRISTOS; SILVA, GERALDO HUMBERTO; BOLZANI, VANDERLAN SILVA; YOUNG, MARIA CLAUDIA M.; PFENNING, LUDWIG HEINRICH; ARAUJO, ANGELA REGINA. [Antifungal Compounds Produced by Colletotrichum gloeosporioides, an Endophytic Fungus from Michelia champaca](#). **Molecules**, v. 19, n. 11, p. 19243-19252, NOV 2014. Citações Web of Science: 0.

ZERAIK, MARIA LUIZA; PETRONIO, MAICON S.; COELHO, DYOVANI; REGASINI, LUIS OCTAVIO; SILVA, DULCE H. S.; DA FONSECA, LUIZ MARCOS; MACHADO, SERGIO A. S.; BOLZANI, VANDERLAN S.; XIMENES, VALDECIR F. [Improvement of Pro-Oxidant Capacity of Protocatechuic Acid by Esterification](#). **PLoS One**, v. 9, n. 10 OCT 23 2014. Citações Web of Science: 0.

ANGNES, RICARDO A.; OLIVEIRA, JULIANA M.; OLIVEIRA, CAIO C.; MARTINS, NELSON C.; CORREIA, CARLOS ROQUE D. [Stereoselective Synthesis of Aryl Cyclopentene Scaffolds by Heck-Matsuda Desymmetrization of 3-Cyclopentenol](#). **CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL**, v. 20, n. 41, p. 13117-13121, OCT 6 2014. Citações Web of Science: 5.

OLIVEIRA, CAIO C.; MARQUES, MARCELO V.; GODOI, MARLA N.; REGIANI, THAIS; SANTOS, VANESSA G.; DOS SANTOS, EMERSON A. F.; EBERLIN, MARCOS N.; SA, MARCUS M.; CORREIA, CARLOS R. D. [Chemo-, Regio- and Stereoselective Heck Arylation of Allylated Malonates: Mechanistic Insights by ESI-MS and Synthetic Application toward 5-Arylmethyl-gamma-lactones](#). **ORGANIC LETTERS**, v. 16, n. 19, p. 5180-5183, OCT 3 2014. Citações Web of Science: 2.

PIVATTO, MARCOS; BACCINI, LUCIENE R.; SHARMA, ABHINAY; NAKABASHI, MYNA; DANUELLO, AMANDA; VIEGAS JUNIOR, CLAUDIO; GARCIA, CELIA R. S.; BOLZANI, VANDERLAN S. [Antimalarial Activity of Piperidine Alkaloids from Senna spectabilis and Semisynthetic Derivatives](#). **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 25, n. 10, p. 1900+, OCT 2014. Citações Web of Science: 0.

CARBALLEIRA, NESTOR M.; BWALYA, ANGELA GONO; ITOE, MAURICE AYAMBA; ANDRICOPULO, ADRIANO D.; CORDERO-MALDONADO, MARIA LORENA; KAISER, MARCEL; MOTA, MARIA M.; CRAWFORD, ALEXANDER D.; GUIDO, RAFAEL V. C.; TASDEMIR, DENIZ. [2-Octadecynoic acid as a dual life stage inhibitor of Plasmodium infections and plasmodial FAS-II enzymes](#). **Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters**, v. 24, n. 17, p. 4151-4157, SEP 1 2014. Citações Web of Science: 0.

BATISTA, ANDREA N. L.; BATISTA, JR., JOAO M.; ASHTON, LORNA; BOLZANI, VANDERLAN S.; FURLAN, MAYSA; BLANCH, EWAN W. [Investigation of DMSO-Induced Conformational Transitions in Human Serum Albumin Using Two-Dimensional Raman Optical Activity Spectroscopy](#). **Chirality**, v. 26, n. 9, SI, p. 497-501, SEP 2014. Citações Web of Science: 1.

TUICHE, MAYRA VENDRAMINI; LOPES, ADRIANA APARECIDA; SILVA, DENISE BRENTAN; LOPES, NORBERTO PEPORINE; PUPO, MONICA TALLARICO. [Direct MALDI-TOF/TOF analyses of unnatural beauvericins produced by the endophytic fungus *Fusarium oxysporum* SS46](#). **REVISTA BRASILEIRA DE FARMACOGNOSIA-BRAZILIAN JOURNAL OF PHARMACOGNOSY**, v. 24, n. 4, p. 433-438, JUL-AUG 2014. Citações Web of Science: 0.

CHAPLA, VANESSA MARA; ZERAIK, MARIA LUIZA; XIMENES, VALDECIR F.; ZANARDI, LISINEIA MARIA; LOPES, MARCIA N.; CAVALHEIRO, ALBERTO JOSE; SILVA, DULCE HELENA S.; YOUNG, MARIA CLAUDIA M.; DA FONSECA, LUIZ MARCOS; BOLZANI, VANDERLAN S.; ARAUJO, ANGELA REGINA. [Bioactive Secondary Metabolites from *Phomopsis* sp., an Endophytic Fungus from *Senna spectabilis*](#). **Molecules**, v. 19, n. 5, p. 6597-6608, MAY 2014. Citações Web of Science: 0.

FERREIRA, RAFAELA S.; DESSOY, MARCO A.; PAULI, IVANI; SOUZA, MARIANA L.; KROGH, RENATA; SALES, ANA I. L.; OLIVA, GLAUCIUS; DIAS, LUIZ C.; ANDRICOPULO, ADRIANO D. [Synthesis, Biological Evaluation, and Structure-Activity Relationships of Potent Noncovalent and Nonpeptidic Cruzain Inhibitors as Anti-*Trypanosoma cruzi* Agents](#). **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 57, n. 6, p. 2380-2392, MAR 27 2014. Citações Web of Science: 5.

MALUF, FERNANDO V.; ANDRICOPULO, ADRIANO D.; OLIVA, GLAUCIUS; GUIDO, RAFAEL V. C. [A pharmacophore-based virtual screening approach for the discovery of *Trypanosoma cruzi* GAPDH inhibitors](#). **Future Medicinal Chemistry**, v. 5, n. 17, p. 2019-2035, NOV 2013. Citações Web of Science: 5.

CHAGAS, FERNANDA O.; DIAS, LUIS G.; PUPO, MONICA T. [A Mixed Culture of Endophytic Fungi Increases Production of Antifungal Polyketides](#). **Journal of Chemical Ecology**, v. 39, n. 10, p. 1335-1342, OCT 2013. Citações Web of Science: 3.

BATISTA, ANDREA N. L.; BATISTA, JR., JOAO M.; BOLZANI, VANDERLAN S.; FURLAN, MAYSA; BLANCH, EWAN W. [Selective DMSO-induced conformational changes in proteins from Raman optical activity](#). **Physical Chemistry Chemical Physics**, v. 15, n. 46, p. 20147-20152, 2013. Citações Web of Science: 7.