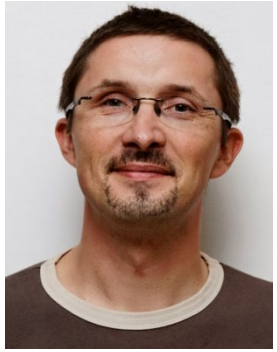
Institut de Recherche pour le Développement
FRANCE

CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique des substances naturelles



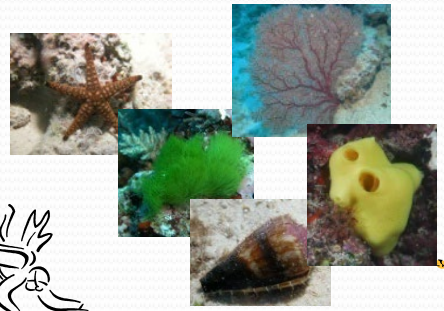
Sylvain PETEK
CR IRD - Chimie des substances naturelles marines
UMR 6539 - LEMAR
IUEM, Plouzané

Adrien CHEYPE
Ingénieur en développement logiciel
Pôle « Informatique Scientifique et Appui aux Partenaires du Sud »
IRD-DDUNI Nouméa

Constat de départ

Observations

Biotope



Taxonomie

Répartition

Phylogénie

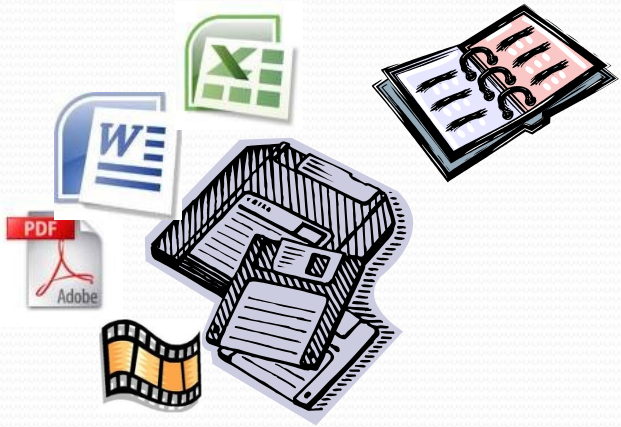
Procédés

Molécules

Activités

Travaux pluridisciplinaires
Collaborateurs multiples

Hétérogénéité
des supports, des formats,
des données



Problèmes

➔Actualiser

➔Accéder/partager les données

➔ Recouper, analyser

➔Pérenniser

Objectifs

→ Capitaliser et pérenniser les données sur le long terme

→ Améliorer le travail collaboratif

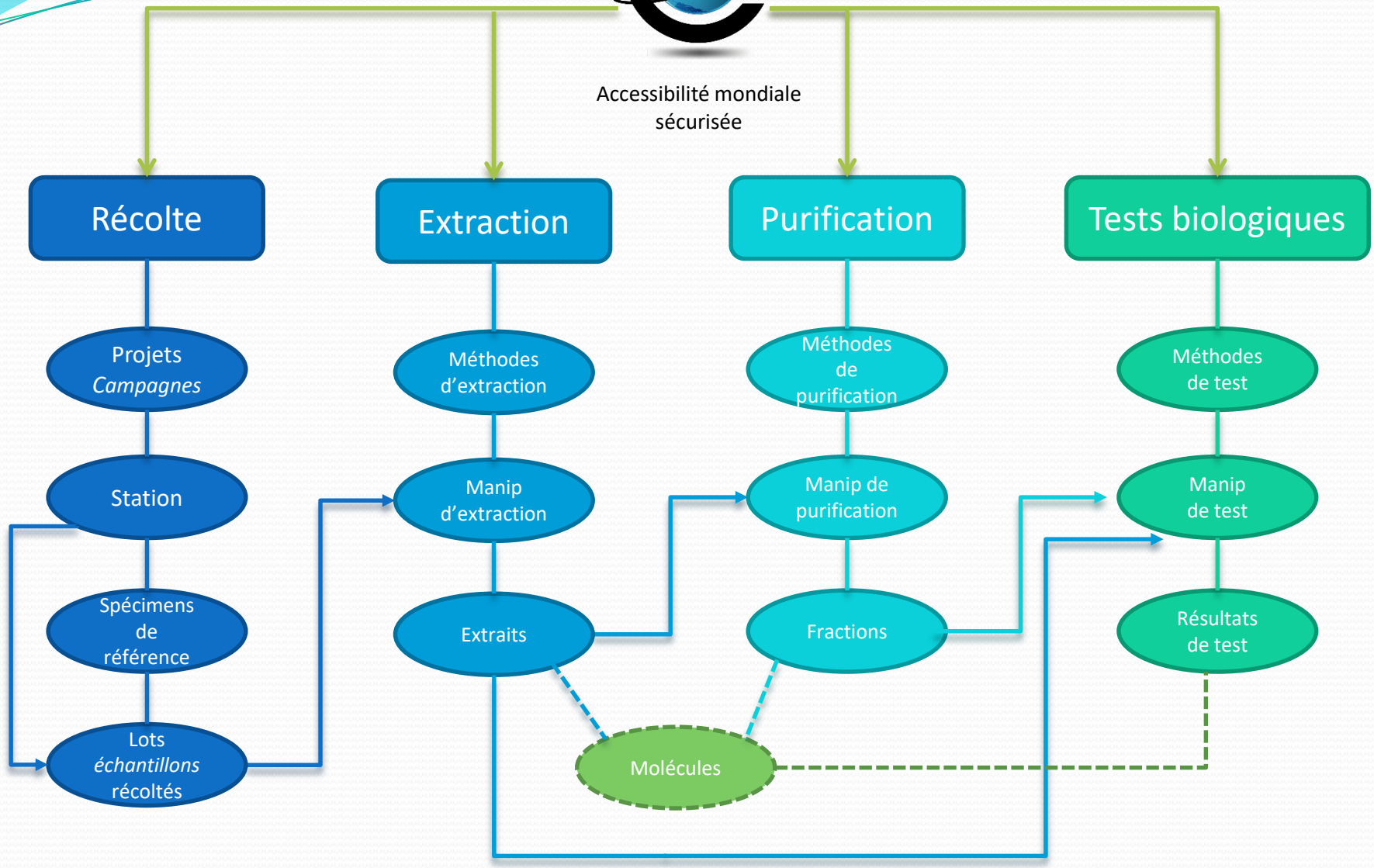
→ Assurer une traçabilité des échantillons de la récolte à la molécule

→ Optimiser la gestion des données

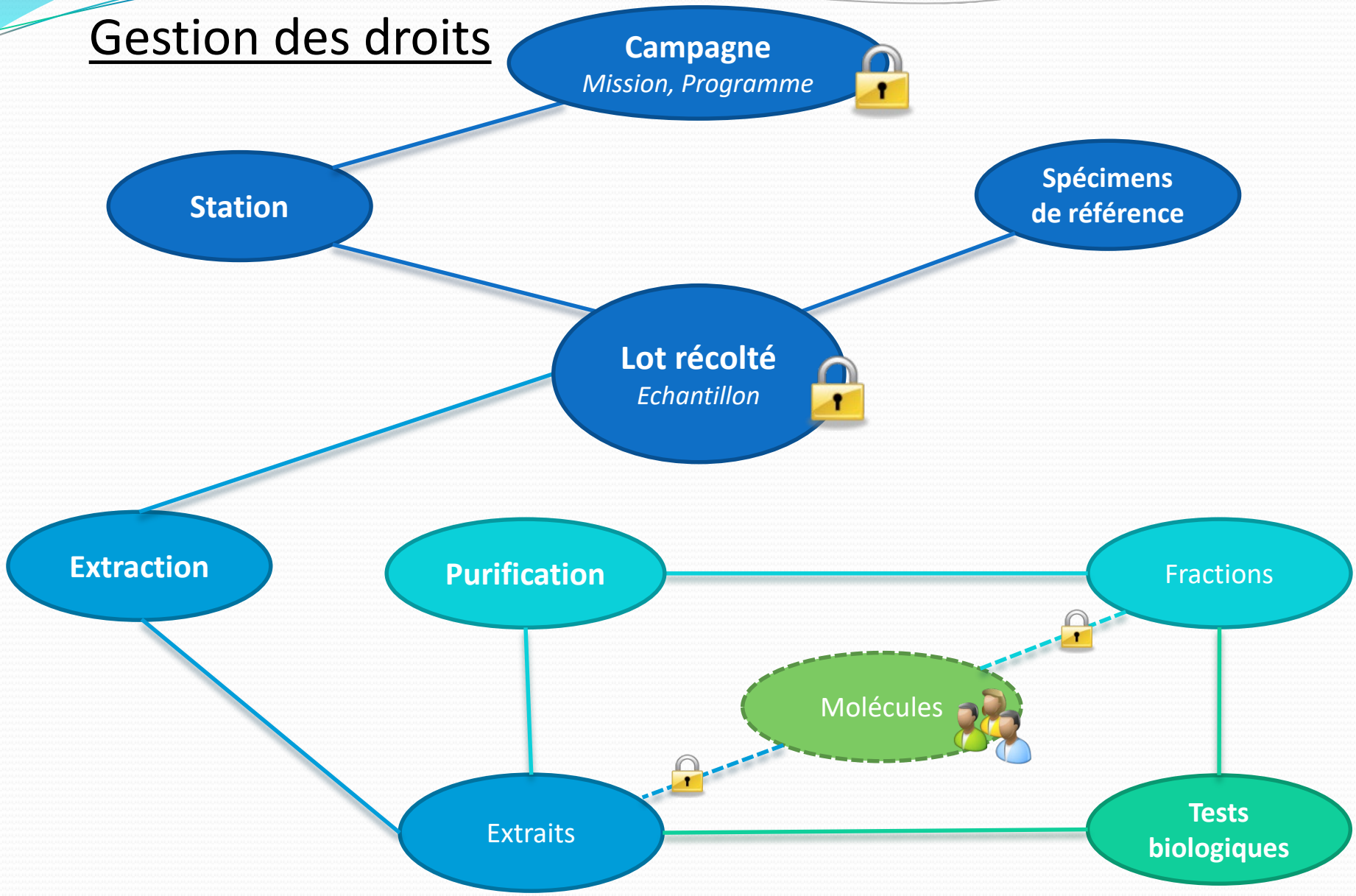
→ Partager les données de manière contrôlée

→ Diffuser les travaux auprès des pays, collectivités prospectés ➔ Démarche APA

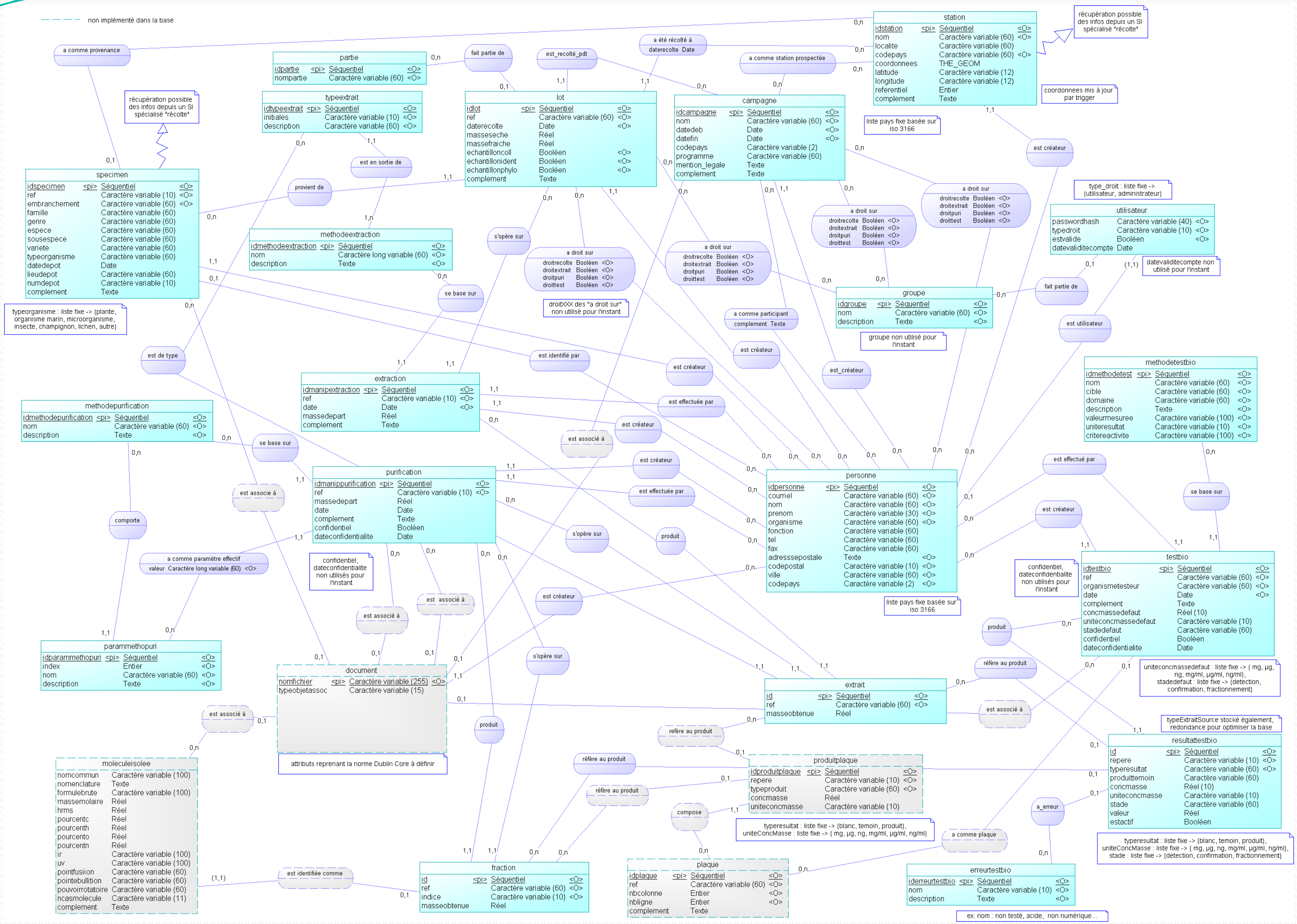
→ Distribuer l'outil en tant que logiciel à part entière


Accessibilité mondiale
sécurisée
Récolte
Extraction
Purification
Tests biologiques
Projets
Campagnes
Station
Spécimens
de
référence
Lots
échantillons
récoltés
Méthodes
d'extraction
Manip
d'extraction
Extraits
Méthodes
de
purification
Manip de
purification
Fractions
Méthodes
de test
Manip
de test
Résultats
de test
Molécules

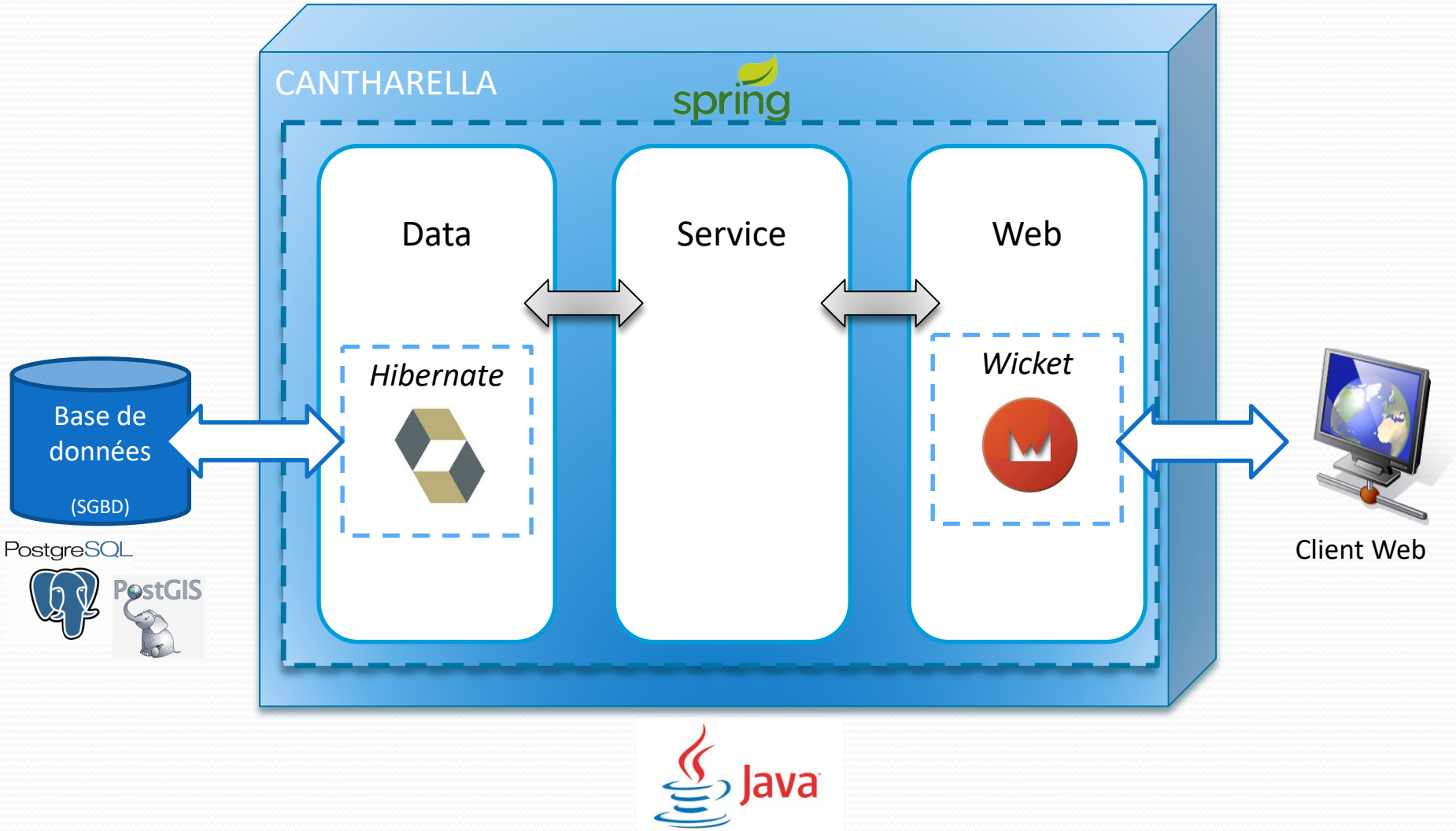
Gestion des droits



Institut de Recherche pour le Développement
FRANCE



Technologie informatique « Open Source »



➔ Diffusion du logiciel sous licence libre (Affero GPL)

Accès informations utilisateur

Paramétrage du système *(Administrateur)*

Moteur de recherche

Retour à la page d'accueil

Menu déroulant

Choix de la langue

Zone de notification

Ajout d'une nouvelle fiche

Import de données

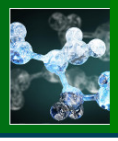
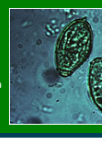
Tri en cliquant sur l'entête de colonne

Consultation de la fiche *(icone loupe ou lien)*

Edition de la fiche *(icone stylo)*

Indication de fichiers joints *(icone trombone, détails en survolant)*

Export du tableau au format CSV

Institut de Recherche pour le Développement FRANCE

Consultation d'une campagne

Choix de la langue : Français English

Nom BSM-PF1_(SOCIETE)

Pays Polynésie française

Date de début 07/08/2009

Date de fin 23/08/2009

Programme POMARE - BioPolyVal

Mention légale Coordinateur: Cécile Debitus

Producteurs de données: IRD; Université de la Polynésie Française; ICSN-CNRS; Queensland Museum; Université Paris Sud

Bailleurs de fond: IRD, ANR, Etat, Polynésie Française

Lien fiche sismer: http://dx.doi.org/10.17600/9100030

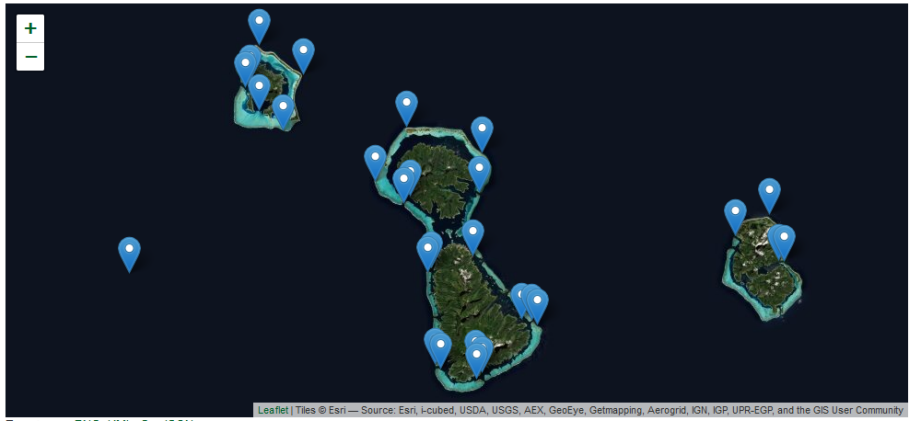
Complément Cette campagne a pour objectif d'échantillonner le benthos animal des îles hautes de la Polynésie Française, les îles de la Société et les îles Marquises, dans le double but d'une étude de la répartition géographique de la biodiversité dans le Pacifique, en particulier des spongiaires, et d'étudier la composition et les propriétés biologiques des métabolites secondaires des invertébrés récoltés en santé humaine ou d'intérêt environnemental (antioxydants, antibiotiques, antifouling).

Créateur Sylvain PETEK

Administrateur Sylvain PETEK

Participants

Personne	Complément
Cecile DEBITUS	Chef de mission, récolte, échantillonage, rapport
Eric FOLCHER	Resp. Hyperbare, récolte, photo, description organismes et stations
Joel OREMPULLER	Récolte, photo
John BUTSCHER	Récolte, sécurité, resp. gonflage
Andre PHAM	Récolte, échantillonnage
Nicolas MAIHOTA	Récolte, sécurité



Exporter en PNG KML GeoJSON

Stations prospectées

Station	Pays	Localité	Latitude	Longitude
SBB1	Polynésie française	Société - Bora Bora - Passe Teavanui	16°28.773'S	151°41.287'W
SBB2	Polynésie française	Société - Bora Bora - Baie De Faanui	16°29.332'S	151°46.069'W
SBB3	Polynésie française	Société - Bora Bora - Récif Papaiore	16°33.591'S	151°43.132'W
SBB4	Polynésie française	Société - Bora Bora - Baie De Povai	16°31.824'S	151°45.235'W
SBB5	Polynésie française	Société - Bora Bora- Pointe Ti Paherire	16°26.240'S	151°45.208'W
SBB6	Polynésie française	Société - Bora Bora - Récif Papapipi	16°29.893'S	151°46.497'W
SH1	Polynésie française	Société - Huahiné - Pointe Te Manua	16°40.807'S	150°59.639'W

Document(s) attaché(s)

Titre	Type de document	Créateur	Lien
GPS	Point(s) GPS	Sylvain PETEK	
Carte Global	Carte	Sylvain PETEK	
Article Hall et al	Article	Cecile DEBITUS	

Droits

Personne	Lot
Gael LECELLIER	Tous
Cecile DEBITUS	Tous
Eric FOLCHER	Tous
Joel OREMPULLER	Tous
Dirk ERPENBECK	Tous
Celine MORIOU	Tous

Modifier Supprimer Retour

Tous droits réservés - 2022

Bienvenue **Sylvain PETEK** Déconnexion

Chercher

CANTHARELLA
Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

Echantillonnage | Traitements | Chimie | Biologie

Institut de Recherche pour le Développement
FRANCE

Consultation d'une station

Choix de la langue : Français English

Nom ARAP08

Pays Polynésie française

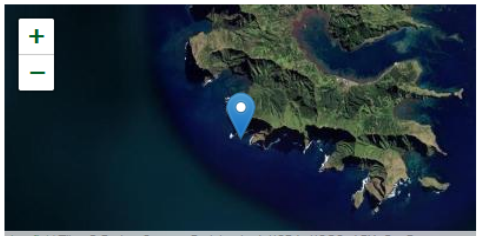
Localité Australes - Rapa - Pointe Tekateke

Complément
Situation: SE de la pointe Tekateke
Profondeur: 33
Visibilité: 5-10 m
Dist. prospectée: 30-50m
Courant: faible
Vent dominant: Sud-Est
Milieu: Pente cotiere
Morphologie du site: pente moyenne
Substrat: Roche sable

Commentaire: Pente de roches et caillasses (taille 30cm à 2m,
plates ou massives) de 14 à 30m avec présence de Lobophora sp puis cuvette de sable grossie
Lobophora et Dictyota sp

LISTE DES ORGANISMES OBSERVES
Coraux: Stylaster (3) blanc sous les roches, très fin
Algues: Lobophora cf variegata (4) 33m, Dictyota sp (3) 33 m
Eponges: P432 (1) 28m; P438 (2) 20-28m; P437 (1) 25m; P436 (1) 25m
Ascidies: T41 (3) 14-30m; T43 (2) 16 - 22m
Echinodermes: Acanthaster planci (1) 30m photo Cécile, cf Echinometra mathei (1) 24m photo
Mollusques:
Autres :

Créateur Sylvain PETEK



Leaflet | Tiles © Esri — Source: Esri, i-cubed, USDA, USGS, AEX, GeoEye, Getmapping, Aerogrid, IGN, IGP, UPR-EGP, and the GIS User Community

Exporter en PNG KML GeoJSON

Coordonnées

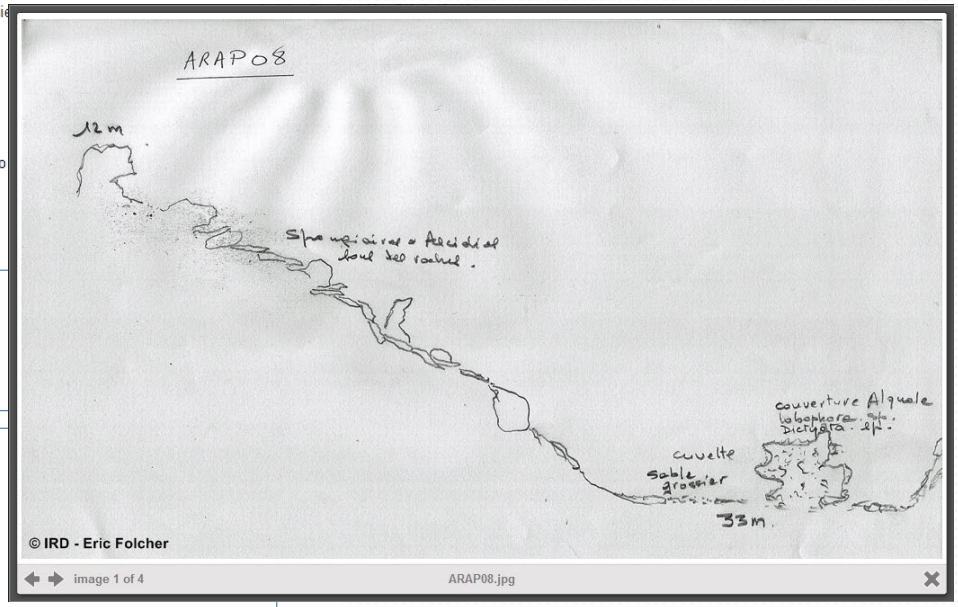
Latitude 27°38.013'S

Longitude 144°21.980'W

Référentiel WGS84

Document(s) attaché(s)

Titre	Type de document	Créateur	Lien
Profil	Profil de site	Eric FOLCHER	
Ambiance	Photo ambiance	Anthony BERBERIAN	
Ambiance (2)	Photo ambiance	Anthony BERBERIAN	
Acanthaster	Photo in situ	Cecile DEBITUS	



© IRD - Eric Folcher

image 1 of 4 ARAP08.jpg

Bienvenue **Sylvain PETEK** Déconnexion

Chercher

CANTHARELLA
Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

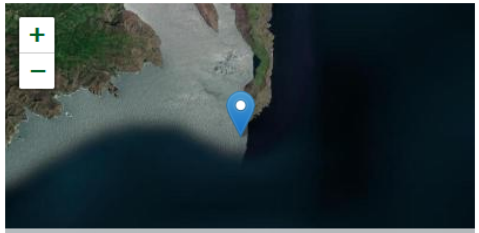
Echantillonnage | Traitements | Chimie | Biologie

Institut de Recherche pour le Développement FRANCE

Consultation d'un spécimen

Choix de la langue : Français English

Référence	P104
Embranchement	*Porifera*
Famille	*Aplysinellidae*
Genre	*Suberea*
Espèce	*2093*
Sous-espèce	-
Variété	-
Type d'organisme	Organisme marin
Identifié par	Patricia SUTCLIFFE
Station de provenance	MNH1
Complément	Milieu Tombant de pinnacle rocheux Substrat Roche Prof. d'abondance 25 m mini 45 m maxi Forme Plaque (< à 5 cm d'épaisseur) Aspect de surface Consistance Souple Couleur in situ Jaunâtre Couleur en coupe Jaunâtre Couleur ex situ Jaune
Créateur	Sylvain PETEK

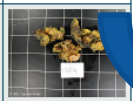


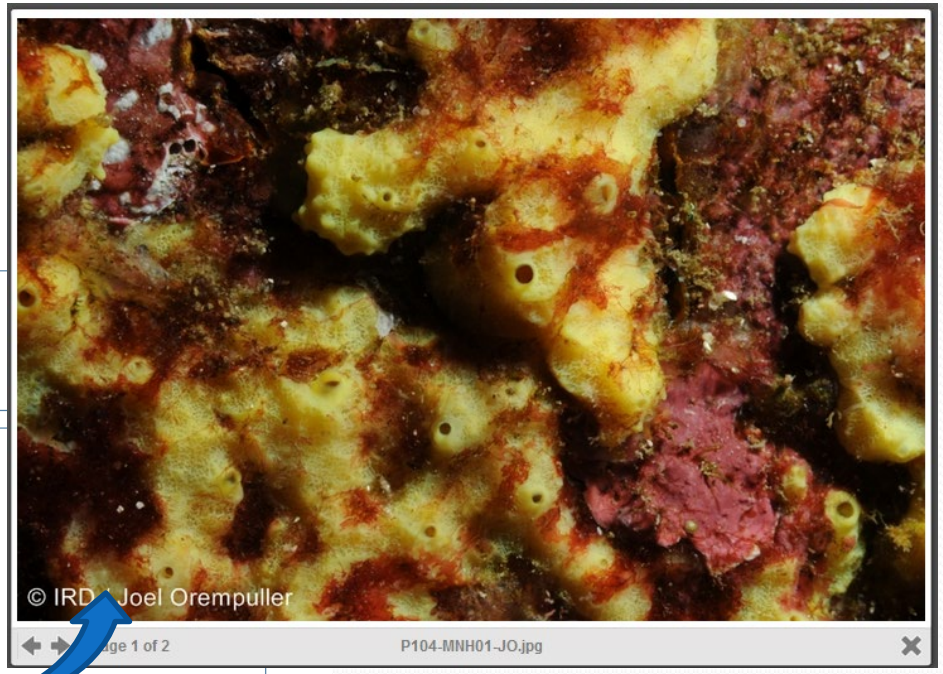
Exporter en PNG KML GeoJSON

Dépôt

Numéro	G331077
Date	-
Lieu	Queensland Museum, Brisbane, Australie

Document(s) attaché(s)

Titre	Type de document	Créateur	Lien
InSitu	Photo in situ	Joel OREMPULLER	
ExSitu	Photo ex situ	Sylvain PETEK	



Modifier Supprimer Retour

Bienvenue **Sylvain PETEK** Déconnexion

Chercher

CANTHARELLA
Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

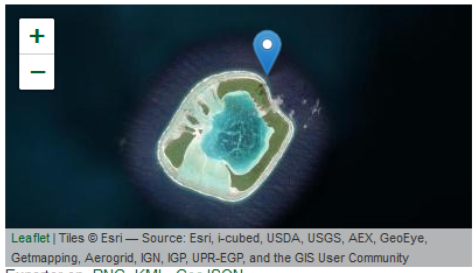
Echantillonnage | Traitements | Chimie | Biologie

Institut de Recherche pour le Développement FRANCE

Consultation d'un lot

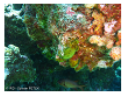
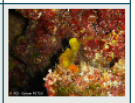
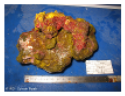
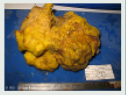
Choix de la langue : Français English

Campagne	LOF-SOCIETE
Station	SBE2_(FPBE16)
Date de récolte	22/09/2012
Référence	P402-SBE2
Spécimen de référence	P402
Partie	organisme entier
Masse fraîche (g)	1 000,00
Masse sèche (g)	45,00
Échantillon collection	non
Échantillon identification	non
Échantillon phylogénie	oui
Complément	Identification sous réserve
Créateur	Emile BONNO



Exporter en PNG KML GeoJSON

Document(s) attaché(s)

Titre	Type de document	Créateur	Lien
InSitu	Photo in situ	Sylvain PETEK	
InSitu	Photo in situ	Sylvain PETEK	
ExSitu	Photo ex situ	Sylvain PETEK	
ExSitu	Photo ex situ	Sylvain PETEK	

Modifier Supprimer Retour

Bienvenue Sylvain PETEK Déconnexion

Chercher

CANTHARELLA
Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

Echantillonnage | Traitements | Chimie | Biologie

Institut de Recherche pour le Développement FRANCE

Consultation d'une extraction

Choix de la langue : Français English

Réf. extraction MANIP01

Manipulateur Sylvain PETEK

Date 02/02/2022

Réf. lot ECH10

Masse à extraire (en g) 100,00

Complément Extraction fictive

Créateur Sylvain PETEK

Méthode d'extraction

Nom Maceration DCM/MeOH

Description

- ▶ Macération dans un mélange CH2CL2/MeOH 50/50 (3x12h).
- ▶ Après filtration et décantation, les phases organiques ont été réunies puis évaporées sous pression réduite.
- ▶ L'extrait "brut" a été repris avec du DCM puis de l'éthanol absolu et centrifugé. Le surnageant a été prélevé et é réduite pour délivrer l'extrait sec DM.

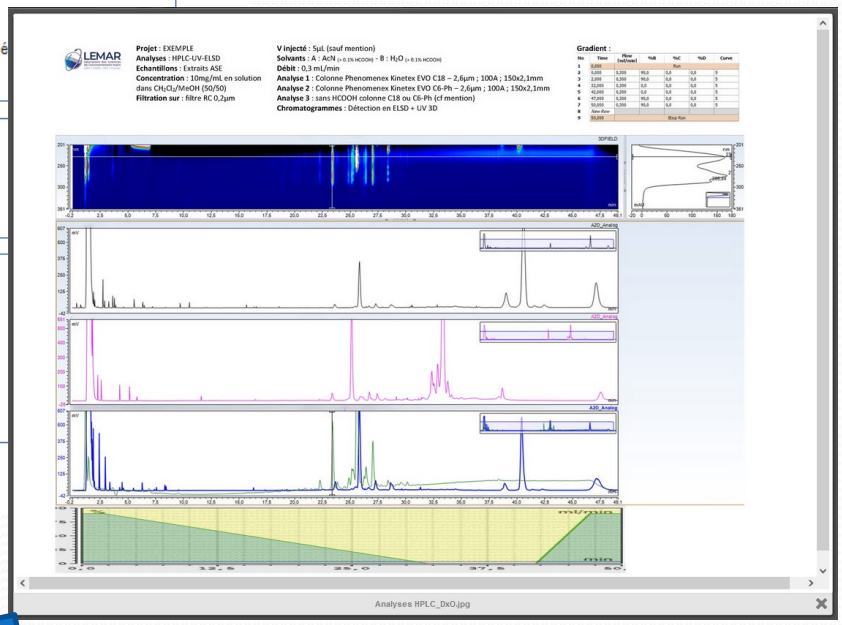
Extraits

Type d'extrait	Réf. extrait	Masse obtenue (en g)	Rendement
DM	ECH10-DM	2,56	2,56 %

Document(s) attaché(s)

Titre	Type de document	Créateur	Lien
Analyses HPLC	Chromatogramme	Sylvain PETEK	

Modifier Supprimer Retour



Bienvenue Sylvain PETEK Déconnexion

Chercher

CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

Echantillonnage | Traitements | Chimie | Biologie

Institut de Recherche pour le Développement FRANCE

Consultation d'une purification

Choix de la langue : Français English

Réf. purification MANIP06

Manipulateur Sylvain PETEK

Date 04/04/2022

Réf. produit ECH10-DM

Masse à purifier (en g) 2,5

Complément Purification fictive

Créateur Sylvain PETEK

Méthode de purification

Nom Chromatographie

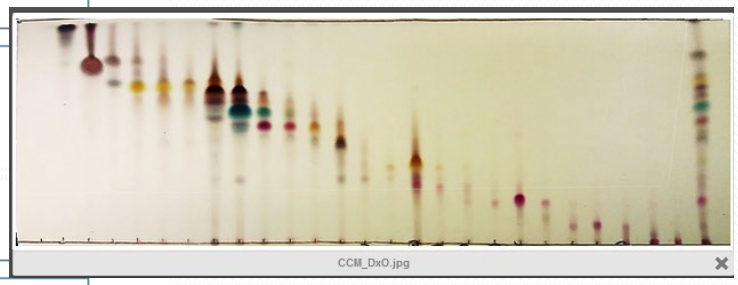
Description Chromatographie sur colonne par gravimétrie

Paramètres

PHASE_STATIONNAIRE	Silice
GRANULOMETRIE	40-60
MASSE	75
DIAMETRE	50
SOLVANT_A	Cyclohexane
SOLVANT_B	AcOEt
SOLVANT_C	DCM
SOLVANT_D	MeOH
ADDITIF	-
GRADIENT	CyH/AcOEt (de 0 à 100%) par palier de 10%, puis DCM/MeOH 80/20, 50/50
VOLUME	250

Fractions

N° de fraction	Réf. fraction	Masse obtenue (en g)	Rendement
1	ECH10-F01	0,0250	1 %
2	ECH10-F02	0,0360	1,44 %
12	ECH10-F12	0,3590	14,36 %
13	ECH10-F13	0,4820	19,28 %



Document(s) attaché(s)

Titre	Type de document	Créateur	Lien
CCM	Autre	Personne FICTIVE	

Modifier Supprimer Retour

Bienvenue **Sylvain PETEK** Déconnexion

Chercher

CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

Institut de Recherche pour le Développement FRANCE

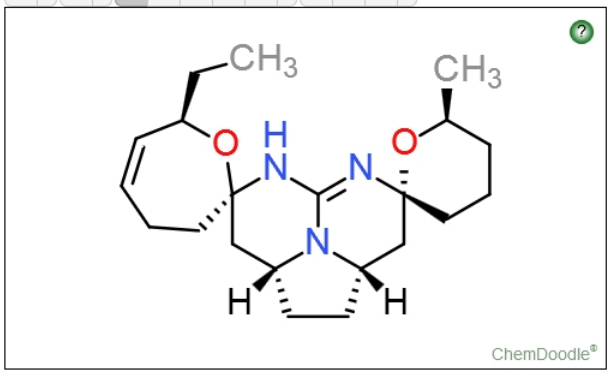
Gestion d'une molécule

Choix de la langue : Français English

Nom commun: Crambescidin 359

Famille Chimique: Alcaloïde

Formule développée



Nom IUPAC:

* Formule brute: C21H33N3O2

* M (g/mol): 359,26

Complément:

```
Braekman, J. C.; Daloze, D.; Tavares, R.; Hajdu, E.; Van Soest, R. W. M.
J. Nat. Prod. 2000, 63, 193-196.
```

* Créateur de la fiche: Sylvain PETEK

Provenance

* Réf. Produit	%	Réf. Lot	Genre	Espèce	Campagne	Actions
P149-MUP8D		P149-MUP8	Higginsia	anfractuosa	BSM-PF1_(MARQUISES)	Supprimer
Faites voti						Ajouter

Document(s) attaché(s)

Titre	Type de document	Créateur	Lien	Actions
Pub Braekman 2000	Bibliographie	Sylvain PETEK		Supprimer

Joindre un nouveau document

2000-JNatProd-63-193-196-Monanchora.pdf - Adobe Reader

Fichier Edition Affichage Fenêtre Aide

1 / 4 78,2% Outils Signer Commentaire

J. Nat. Prod. **2000**, *63*, 193−196

Novel Polycyclic Guanidine Alkaloids from Two Marine Sponges of the Genus *Monanchora*

J. C. Braekman,*,† D. Daloze,† R. Tavares,‡ E. Hajdu,§ and R. W. M. Van Soest⊥

Laboratory of Bio-organic Chemistry, Department of Organic Chemistry, Faculty of Sciences, CP160/07, University of Brussels, 50 Avenue F. Roosevelt, 1050 Brussels, Belgium, INETI, Departamento de Tecnologia da Industrias Quimicas, Estrada do Paço do Lumiar, 1649-038 Lisboa, Portugal, Museo Nacional, Departamento de Invertebrados, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Quinta da Boa Vista, s/n 20940-040, Rio de Janeiro, Brazil, and Institute of Systematics and Population Biology, University of Amsterdam, P.O. Box 94766, 1090-GT, Amsterdam, The Netherlands

Received August 16, 1999

Two marine sponges of the genus *Monanchora* (Poecilosclerida, Crambeidae) have been found to contain new polycyclic guanidine alkaloids bearing the (5,6,8*b*)-triazaperhydroacenaphthylene skeleton. Their structures have been determined by detailed spectroscopic analysis. Dehydrobatzelladine C (**1**) has been isolated from *M. arbuscula* and crambescidins 359 (**2**) and 431 (**3**) from *M. unguiculata*. The chemotaxonomic implications of these findings are discussed.

Since the isolation by Kashman et al.[1] of ptilomycalin A from a Caribbean sponge identified as *Ptilocaulis spiculifer* and from a Red Sea sponge identified as *Hemimycale* sp., several alkaloids possessing the unique (5,6,8*b*)-triazaperhydroacenaphthylene system have been reported from four other marine sponge samples: crambescidins 800, 816, 830, and 844; isocrambescidin 800; and crambidine; from several samples of the Mediterranean sponge *Crambe crambe*,[2−4] crambescidin 800; from a Brazilian specimen of *Monanchora arbuscula*,[5] ptilomycalin A, crambescidins 800 and 816, and batzelladines A−E from *Batzella* sp.,[6] collected in the Bahamas; and batzelladines F−I from another *Batzella* sp. collected in Jamaica.[7] Interestingly, Palagiano et al. reported recently the puzzling discovery of the same type of compounds (crambescidin 800, ptilomycalin A, celeromycalin, and fromiamycalin) from two New Caledonian starfish, *Celerina heffernani* and *Fromia monilis*.[8] Many of these cyclic guanidine derivatives show noteworthy biological activities (e.g., HIV gp120-human CD4-binding inhibition,[6] p56^{lck}-CD4 dissociation induction,[7] Ca^{2+} channel blocker activities,[2] cytotoxicity,[8] and antifungal and antimicrobial activities[3]).

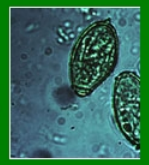
It has been suggested by Van Soest et al.[9] that, because of similar morphological characters and identical secondary metabolite content, the above-mentioned sponges should eventually be united in the same genus. To evaluate the validity of this suggestion, the secondary metabolite content of another species of *Monanchora*, namely, *M. unguiculata*, was investigated. This led to the isolation of two new cyclic guanidine alkaloids bearing the (5,6,8*b*)-triazaperhydroacenaphthylene skeleton, crambescidin 359 (**2**) and crambescidin 431 (**3**). Moreover, a further cyclic guanidine alkaloid, dehydrobatzelladine C (**1**), was isolated from *M. arbuscula*. The structure determination of these new compounds, except the absolute configuration, is presented herein. These compounds occur naturally as the protonated guanidinium salts. This implies that the spectroscopic properties reported for **1**, **2**, and **3** are those of the protonated salts rather than those of the free bases.

* To whom correspondence should be addressed. Tel: 32.2.6502961. Fax: 32.2.6502798. E-mail: braekman@ulb.ac.be.
† University of Brussels.
‡ INETI, Portugal.
§ University of Sao Paulo.
⊥ University of Amsterdam.

Results and Discussion

In a recent paper,[10] we reported the isolation of crambescidin 800, ptilocaulin, and 8b-hydroxyptilocaulin from the methanolic extract of the sponge *M. arbuscula*, collected at Cat Cay Lagoon in the barrier reef of Belize. Further fractionation of this extract by Sephadex LH-20 chromatography, followed by reversed-phase preparative HPLC afforded compound **1** as a slightly brown gum. Its molecular formula was determined as $C_{27}H_{46}N_6O_2$ [(M + H)$^+$ at *m/z* 487.3711 by positive HREABMS]. An intense fragment peak at *m/z* 373.2796 ($C_{22}H_{35}N_3O_2$) revealed the loss from the molecular ion of 113 Da, corresponding to a molecule of 4-guanidino-1-butene, also observed in batzelladine C[6] and resulting from a McLafferty rearrangement. This was confirmed by the presence of an intense peak at *m/z* 114 ($C_5H_{12}N_3$) corresponding to a protonated molecule of 4-guanidino-1-butene. Complete assignments of the ^{1}H and ^{13}C NMR spectra were performed using 1D and 2D NMR experiments (^{1}H−^{1}H COSY, HMQC, HMBC, NOEDS) and are reported in Table 1. The molecule has eight degrees of unsaturation and, because the ^{13}C NMR data require one C=C double bond (δ_C 167.0 and 112.8), one ester carbonyl (δ_C 164.5), and three C=N bonds (δ_C 152.5, 158.8, and 181.4), it must contain three rings. The close relationship between the ^{13}C NMR and UV spectrum (λ_{max} at 206, 258, and 303 nm) of **1** and those of crambidine[2] immediately suggested that **1** possessed the same chromophore as the latter. In addition, the presence of the 4-guanidino−*n*-butyl chain was confirmed because the chemical shifts of the hydrogen and carbon atoms of this part of the molecule are nearly identical with those of its counterparts in crambescin A[11] and batzelladine C.[6] The presence of a pentyl side chain at C-15 and an heptyl side chain at C-8 was ascertained by NMR (Table 1) and MS data. In particular, the ^{1}H NMR spectrum of **1** contained a contiguous series of signals from the two allylic H-12 (δ 3.54 and 3.30) proton signals to the H-8 signal at δ 3.78, itself coupled to the first methylene (H_2-7) of the heptyl side chain (δ 1.84 and 1.64). On the other hand, a correlation between C-15 (δ_C 181.4) and the hydrogen atoms of the two first methylene groups of the pentyl side chain (H_2-16, δ 3.06) and the H_2C-17 methylene at δ 1.72 in the HMBC spectrum allowed us to locate the pentyl chain on the heterocyclic skeleton of **1**. The relative configuration of **1** could be established by NOE difference spectra, which

10.1021/np990403g CCC: $19.00 © 2000 American Chemical Society and American Society of Pharmacognosy
Published on Web 01/19/2000



Institut de Recherche pour le Développement FRANCE

Consultation d'un test biologique

Réf. test TC-S1

Manipulateur Thierry CRESTEIL

Organisme testeur Cnrs - Icsn

Date 01/12/05

Méthode de test

Nom Cellules KB

Cible (acronyme) KB

Domaine Cytotoxicité

Description Test de cytotoxicité sur cellule KB.

Au bout de 72 h de contact, la prolifération cellulaire en présence des molécules à tester est évaluée par rapport aux cultures témoins non traitées (recevant le même volume de DMSO : 1% du volume soit 2µl au maximum). Pour cela, on ajoute 40 µl de MTS (réactif Proméga) qui se fixe sur les mitochondries des cellules vivantes et est réduit en un dérivé formazan coloré qui absorbe à 490 nm. Après 2 heures d'incubation, la densité optique de chaque puits est mesurée au spectrophotomètre. On calcule le pourcentage de cellules vivantes par rapport au contrôle et les résultats sont exprimés en pourcentage d'inhibition de la croissance cellulaire [(1-(OD490 traitées/OD490 contrôle))×100] ou en concentration pour l'IC50 (concentration donnant une inhibition de 50%).

Valeur plancher: 50%

Valeur mesurée Pourcentage d'inhibition de la croissance cellulaire

Critère d'activité Supérieur à 50%

Unité du résultat %

Conc./Masse par défaut 10,00 µg/ml

Stade par défaut Détection

Complément -

Créateur Sylvain PETEK

Résultats

Repère	Type	Réf. produit	Prod. témoin	Conc./Masse	Stade	Valeur	Actif	Erreur
S1-A2	Produit	R3002C		10,00 µg/ml	Détection	73,00	oui	
S1-A3	Produit	R3052C		10,00 µg/ml	Détection	78,00	oui	
S1-A4	Produit	R3070C		10,00 µg/ml	Détection		non	<50%
S1-A5	Produit	R3116C		10,00 µg/ml	Détection		non	<50%
S1-A6	Produit	R3149C		10,00 µg/ml	Détection	58,00	oui	
S1-A7	Produit	R3002B_DESS		10,00 µg/ml	Détection		non	<50%
S1-A8	Produit	R3070B_DESS		10,00 µg/ml	Détection		non	<50%
S1-A9	Produit	R3052B_DESS		10,00 µg/ml	Détection		non	<50%
S1-A10	Produit	R3116B_DESS		10,00 µg/ml	Détection	100,00	oui	
S1-A11	Produit	R3149B_DESS		10,00 µg/ml	Détection		non	<50%

Bienvenue Sylvain PETEK Déconnexion

Chercher

CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

Echantillonnage | Traitements | Chimie | Biologie

Recherche

Choix de la langue : Français English

Recherche de données | Recherche de documents

Rechercher des termes (ou des parties de termes avec *). Pour une utilisation plus avancée de la recherche, consulter la synthaxe complète.

Requête

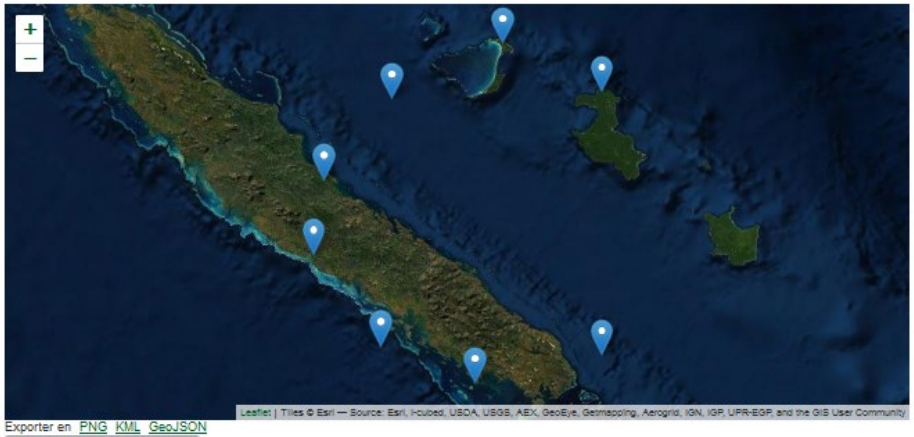
Requête: exemple

Pays: Faites votre choix

Bornes de latitude

Bornes de longitude

Rechercher | Réinitialiser



Exporter en PNG KML GeoJSON

Rechercher dans la zone affichée

Stations

Nom	Pays	Localité	Latitude	Longitude
NC02	Nouvelle-Calédonie	Ouvéa	20°28.060'S	166°36.087'E
NC03	Nouvelle-Calédonie	Ouvéa Large	20°44.413'S	165°56.684'E
NC04	Nouvelle-Calédonie	Grande Terre – Côte Est – Hô	21°11.535'S	165°32.136'E
NC05	Nouvelle-Calédonie	Grande Terre – Bourail – Roche Percée	21°36.401'S	165°28.649'E
NC06	Nouvelle-Calédonie	Grande Terre – Au Large – Axe Passe Boulouparis	22°06.692'S	165°52.713'E
NC01	Nouvelle-Calédonie	Lifou	20°42.330'S	167°11.548'E
NC07	Nouvelle-Calédonie	Grande Terre – Îlot Canard	22°18.772'S	166°26.208'E
NC08	Nouvelle-Calédonie	Grande Terre – Au Large De Goro	22°09.588'S	167°11.443'E

Exporter en CSV

Specimens

Référence	Type d'organisme	Embranchement	Famille	Genre	Espèce	Provenance
EA_IND	Organisme marin	*Echinodermata*	*Asteroidea (class)*			NC03
EE_IND	Organisme marin	*Echinodermata*	*Echinoidea (class)*			NC06
M_IND	Organisme marin	*Mollusca*				NC07
SP01	Organisme marin	*Porifera*	*Axinellidae*	*Cymbastela*	*cantharella*	NC06
SANTAL	Plante	*Plantae*	*Santalaceae*	*Santalum*	*austrocaledonicum*	NC01
EO_IND	Organisme marin	*Echinodermata*	*Ophiurida (ordre)*			NC03
TU_IND	Organisme marin	*Tunicata*				NC08
CAFE	Plante	*Plantae*	*Rubiaceae*	*Coffea*	*arabica*	NC04

Lots

Référence	Date récolte	Station	Spécimen réf.	Type d'organisme	Embranchement	Famille	Genre	Espèce	Partie	m fraîche	m sèche	Campagne	Pays
ECH12	01/01/2022	NC08	TU_IND	Organisme marin	*Tunicata*				organisme entier	159,00	100,00	EXEMPLE	Nouvelle-Calédonie
ECH13	01/01/2022	NC01	SANTAL	Plante	*Plantae*	*Santalaceae*	*Santalum*	*austrocaledonicum*	bois	5 000,00		EXEMPLE	Nouvelle-Calédonie
ECH03	01/01/2022	NC04	CAFE	Plante	*Plantae*	*Rubiaceae*	*Coffea*	*arabica*	fruit	1 500,00	1 300,00	EXEMPLE	Nouvelle-Calédonie
ECH15	01/01/2022	NC05	NIAOULI	Plante	*Plantae*	*Myrtaceae*	*Melaleuca*	*quinquenervia*	feuille	6 357,00		EXEMPLE	Nouvelle-Calédonie
ECH11	01/01/2022	NC07	SP_IND	Organisme marin	*Porifera*				organisme entier	258,00	66,00	EXEMPLE	Nouvelle-Calédonie
ECH09	01/01/2022	NC07	M_IND	Organisme marin	*Mollusca*				organisme entier	87,00		EXEMPLE	Nouvelle-Calédonie

Extractions

Réf. lot	Réf. extraction	Date	Méthode	Masse extraite	Campagne	Extraits
ECH15	MANIP02	03/02/2022	Autre	1 500,00	EXEMPLE	U : 150,00
ECH13	MANIP04	05/02/2022	Autre	1 300,00	EXEMPLE	X : 25,00
ECH09	MANIP07	19/04/2022	ASE-DCM/MeOH	45,00	EXEMPLE	XDM : 0,16
ECH10	MANIP01	02/02/2022	Maceration DCM/MeOH	100,00	EXEMPLE	DM : 2,56
ECH03	MANIP03	04/02/2022	Autre	200,00	EXEMPLE	V : 15,00
ECH14	MANIP05	06/02/2022	Autre	2 400,00	EXEMPLE	Y : 1 369,00

Exporter en CSV

Purifications

Réf. lot	Réf. produit	Réf. purification	Date	Méthode	Campagne
ECH10	ECH10-DM	MANIP06	04/04/2022	Chromatographie	EXEMPLE

Exporter en CSV

Tests biologiques

Cible	Conc	Unité	Réf. produit	Valeur	Unité	Type extrait	Actif	Famille	Genre	Espèce	Pays	Repère	Réf. test
HCT116	1,00	µg/ml	ECH03-KF	100,00	%	V	non	*Rubiaceae*	*Coffea*	*arabica*	Nouvelle-Calédonie	A2	MANIP08
HCT116	1,00	µg/ml	ECH09-XDM	0,10	%	XDM	oui				Nouvelle-Calédonie	A3	MANIP08
HCT116	1,00	µg/ml	ECH13-HUI		%	X	non	*Santalaceae*	*Santalum*	*austrocaledonicum*	Nouvelle-Calédonie	A4	MANIP08
HCT116	1,00	µg/ml	ECH14-HUI		%	Y	non	*Arecaceae*	*Cocos*	*nucifera*	Nouvelle-Calédonie	A5	MANIP08
HCT116	1,00	µg/ml	ECH15-HUI		%	U	non	*Myrtaceae*	*Melaleuca*	*quinquenervia*	Nouvelle-Calédonie	A6	MANIP08
HCT116	1,00	µg/ml	ECH10-DM	20,00	%	DM	oui	*Axinellidae*	*Cymbastela*	*cantharella*	Nouvelle-Calédonie	A1	MANIP08

Exporter en CSV

Molécules

N°	Formule développée	Nom commun	Famille Chimique	Formule brute	M (g/mol)	Nouvelle molécule ?	Embranchement	Genre	Espèce	Réf. Lot	Programme
2		(±)-Eucalyptol	Oxyde terpénique	C10H18O	154,25	non	Plantae	Melaleuca	quinquenervia	ECH15	Démo
3		Santalol	Terpène	C15H24O	220,35	non	Plantae	Santalum	austrocaledonicum	ECH13	Démo
4		Caffeine	Alcaloïde	C8H10N4O2	194,19	non	Plantae	Coffea	arabica	ECH03	Démo
1		Girolline	Amino Imidazole	C6H11ClN4O	190,63	oui	Porifera	Cymbastela	cantharella	ECH10	Démo

Bienvenue Sylvain PETEK Déconnexion

Chercher

CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

Echantillonnage | Traitements | Chimie | Biologie

Recherche

Choix de la langue : Français English

Recherche de données | Recherche de documents

Rechercher des termes (ou des parties de termes avec *). Pour une utilisation plus avancée de la recherche, consulter la synthaxe complète.

Requête

Requête: exemple

Type de document: Faites votre choix

Bornes de latitude

Bornes de longitude

Rec

- Faites votre choix
- Article
- Autre
- Bibliographie
- Chromatogramme
- Communication
- Demande ou Autorisation de prélèvement
- Demande ou Autorisation d'exportation
- Formalités APA
- Formalités Douanes - Sanitaires
- Photo ambiance
- Photo ex situ
- Photo in situ
- Photo microscope
- Profil de site
- Rapport de mission
- Rapport de projet
- RMN 13C
- RMN 1H

Campagnes

	Nom	Pays		Type	Aperçu	
	EXEMPLE	Nouvelle-Calédoni		Demande ou Autorisation de prélèvement		

Exporter en Zip

Stations

	Nom	Pays		Titre	Type	Aperçu	
	NC05	Nouvelle-Calédonie	G	Site	Photo ambiance		
	NC06	Nouvelle-Calédonie	G	Ambiance	Photo ambiance		

Exporter en Zip

Specimens

	Référence	Embranchement	Genre	Espèce	Provenance	Titre	Type	Aperçu	
	SP01	Porifera	Cymbastela	cantharella	NC06	In Situ	Photo in situ		
	CAFE	Plantae	Coffea	arabica	NC04	Planche	Autre		
	AL_IND	Algae			NC06	In Situ	Photo in situ		
	NIAOULI	Plantae	Melaleuca	quinquenervia	NC05	Ecorce	Photo in situ		
	NIAOULI	Plantae	Melaleuca	quinquenervia	NC05	Fleur	Photo in situ		
	NIAOULI	Plantae	Melaleuca	quinquenervia	NC05	Feuilles	Photo in situ		

Lots

	Référence	Embranchement	Genre	Espèce	Provenance	Campagne	Titre	Type	Aperçu	
	ECH10	Porifera	Cymbastela	cantharella	NC06	EXEMPLE	Broyage	Autre		

Exporter en Zip

Extractions

	Référence	Réf. extraction	Date	Méthode d'extraction	Campagne	Titre	Type	Aperçu	
	ECH10	MANIP01	02/02/2022	Maceration DCM/MeOH	EXEMPLE	Analyses HPLC	Chromatogramme		

Exporter en Zip

Purifications

	Référence	Réf. produit	Réf. purification	Date	Méthode de purification	Titre	Type	Aperçu	
	ECH10	ECH10-DM	MANIP06	04/04/2022	Chromatographie	CCM	Autre		

Exporter en Zip

Tests biologiques

	Cible	Réf. test	Date	Méthode de test	Titre	Type	Aperçu	
	HCT116	MANIP08	19/04/2022	Cellules HCT116	Plaque 96 puits	Autre		

Exporter en Zip

Molécules

	N°	Nom commun	Famille Chimique	Formule brute	M (g/mol)	Titre	Type	Aperçu	
	1	Girolline	Amino Imidazole	C6H11ClN4O	190,631	Prediction RMN 13C	RMN 13C		
	1	Girolline	Amino Imidazole	C6H11ClN4O	190,631	Prediction RMN 13C	RMN 13C		
	1	Girolline	Amino Imidazole	C6H11ClN4O	190,631	Prediction RMN 1H	RMN 1H		
	1	Girolline	Amino Imidazole	C6H11ClN4O	190,631	Prediction RMN 1H	RMN 1H		
	1	Girolline	Amino Imidazole	C6H11ClN4O	190,631	Prediction MSMS	SM		
	1	Girolline	Amino Imidazole	C6H11ClN4O	190,631	Prediction MSMS	SM		
	1	Girolline	Amino Imidazole	C6H11ClN4O	190,631	Synthèse de la Girolline	Bibliographie		

Exporter en Zip

Bienvenue **Sylvain PETEK** **Déconnexion**

Chercher

CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration

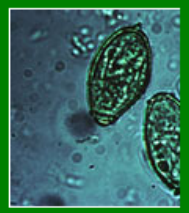
Personnes

Echantillonnage

Traitements

Chimie

Biologie



Configuration

Choix de la langue : Français English

- Liste des parties d'un lot
- Liste des méthodes d'extraction
- Liste des méthodes de purification
- Liste des méthodes de test biologique
- Liste des erreurs pour un test biologique
- Liste des types de documents
- Reconstruire l'index lucene

Cantharella - Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Contact - Mentions légales

Tous droits réservés - 2022

Institut de Recherche pour le Développement FRANCE

Instance Cantharella-LEMAR en quelques chiffres

→ Opérationnelle depuis 2010 *(dernière version 2022)*

- Nb d'utilisateurs: 180 *(255 acteurs)*

→ Nb de projets / campagnes gérés: 40 *(SPOQS, Proteomar, Save-C, Maresistome, HABIS…)*

- Nb de stations : 900
- Nb de spécimens de référence: 1350
- Nb d'échantillons: 3351
- Nb d'extractions: 1223
- Nb de purifications: 130
- Nb de tests biologiques: 10700
- Nb de molécules: 155
- Nb de documents 1750

→ Pays / territoires prospectés: 11 *(Polynésie fr., W&F, Fidji, Djibouti, Mayotte…)*

Points forts du système d'information

→Travail collaboratif entre personnes géographiquement éloignées

→ Accès sécurisé et « cloisonné » en fonction des droits d'accès aux données

→ Traçabilité des processus conduisant aux principes actifs

→ Capitalisation des procédés, des documents…

→ Éditeur de molécules, moteur de recherche, export des données ….

→ Open-source > évolutif : ajout de nouvelles fonctionnalités possible

Quels apports pour la communauté?

→ Un retour d'informations scientifiques pour les collectivités / pays ➔ Démarche APA

→ La mise en œuvre de programmes de valorisation à partir des données recueillies

→ Une base de connaissances pour l'émergence de nouvelles recherches

→ Une sauvegarde des travaux effectués et un accès facilité aux données

→ Un travail en collaboration plus efficace et plus « standardisé »

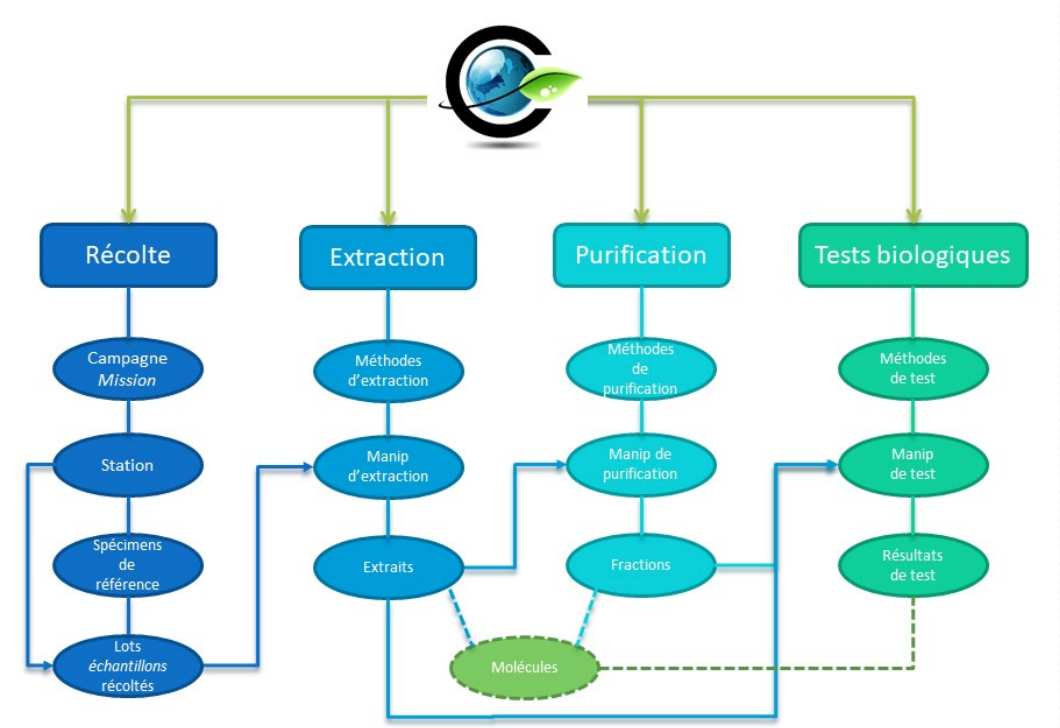
→ …

Diffusion et évolutions à venir

→ D'autres instances en service: PHARMA-DEV icoa LBCM Laboratoire de Biotechnologie et Chimie Marines

→ A venir: lipidocean Marine lipid analytic platform UBO CNRS IRD IFREMER CERD GDRI-Sud QUALITY

→ Evolutions:

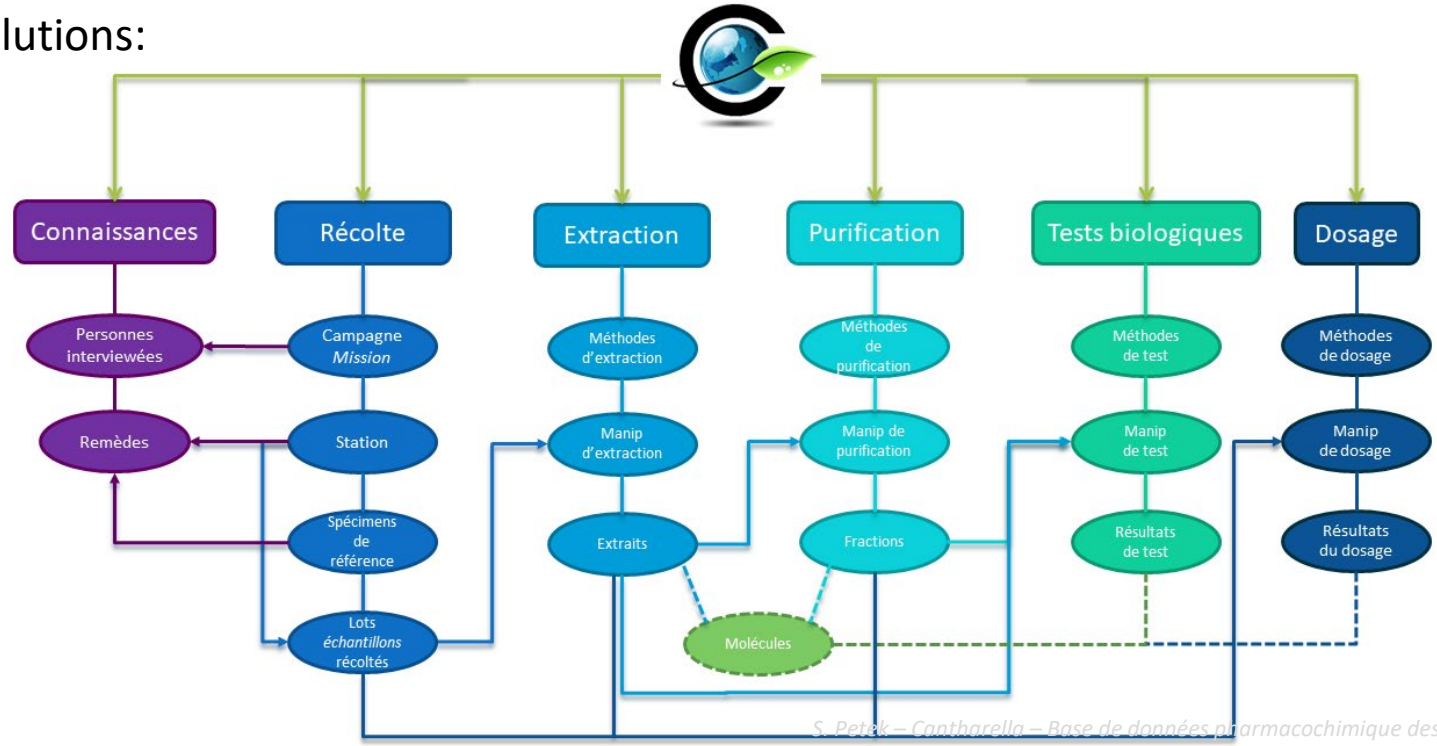


Diffusion et évolutions à venir

→ D'autres instances en service: PHARMA-DEV, icoa, LBCM

→ A venir: lipidocean, CERD, GDRI-Sud QUALITY

→ Evolutions:



→ Financements: SPIRALES – DSI, DVS et Département OCEANS de l'IRD

→ Soutiens :

- UMR 152 Pharma-Dev; UMR 7138 SAE; UMR 241 EIO; UMR 6539 LEMAR

→ Conception-Développements informatique:

- Sylvain Petek *(porteur du projet/conception/administrateur du SI)*

❑ Pôle « Informatique Scientifique et Appui aux Partenaires du Sud » – IRD Nouméa

- Adrien Cheype *(conception/gestion projet/développements)*
- Mickael Tricot *(choix technologiques/développements)*
- Alban Diguer *(développements)*

❑ Code Lutin - Nantes

- Benjamin Poussin *(choix technologiques/développements)*
- Eric Chatellier *(développements)*
- Yannick Martel *(développements)*
- Cécilia Bossard *(développements)*
- Jean Couteau *(développements)*

→ Echanges, Discussions, Contributions…

- D. Aline, B. Granouillac, S. Debard *(IRD – DSI)*
- R. Ferron *(IRD – DVS)*
- C. Moretti *(IRD – UMR7138)*
- C. Debitus *(IRD – UMR6539)*
- M. Haddad, D. Laurent *(IRD – UMR152)*
- C. Payri, S. Fiat *(IRD – UMR227)*
- F. Charleux *(IRD – PF)* – *Création du Logo*
- E. Coste *(IRD – DIC, Pôle Web)* – *Relookage de l'interface*

- L. Corsini *(IRD – DIC)* – *Création du dépliant*
- A. Al-Mourabit, F. Guéritte, M. Litaudon, V. Dumontet, C. Poullain *(ICSN - CNRS)*
- P. Jaufret, K. Tran, M. Hibert *(Chimiothèque nationale)*
- J.-M. Kornprobst *(Université de Nantes)*
- S. Labarre *(CNRS - Station biologique Roscoff)*
- C. Richert *(Université de la Nouvelle Calédonie)*
- J. Boustie *(Faculté de pharmacie de Rennes)*
- …..

Institut de Recherche pour le Développement
FRANCE

CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique
des substances naturelles

Instance de démonstration sur : ***https://cantharella-demo.ird.fr/***

Informations et téléchargements sur
https://www-iuem.univ-brest.fr/lemar/projets-scientifiques/cantharella/
ou
HAL: https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01887126