



CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique
des substances naturelles



Sylvain PETEK

CR IRD - Chimie des substances naturelles marines

UMR 6539 - LEMAR

IUEM, Plouzané



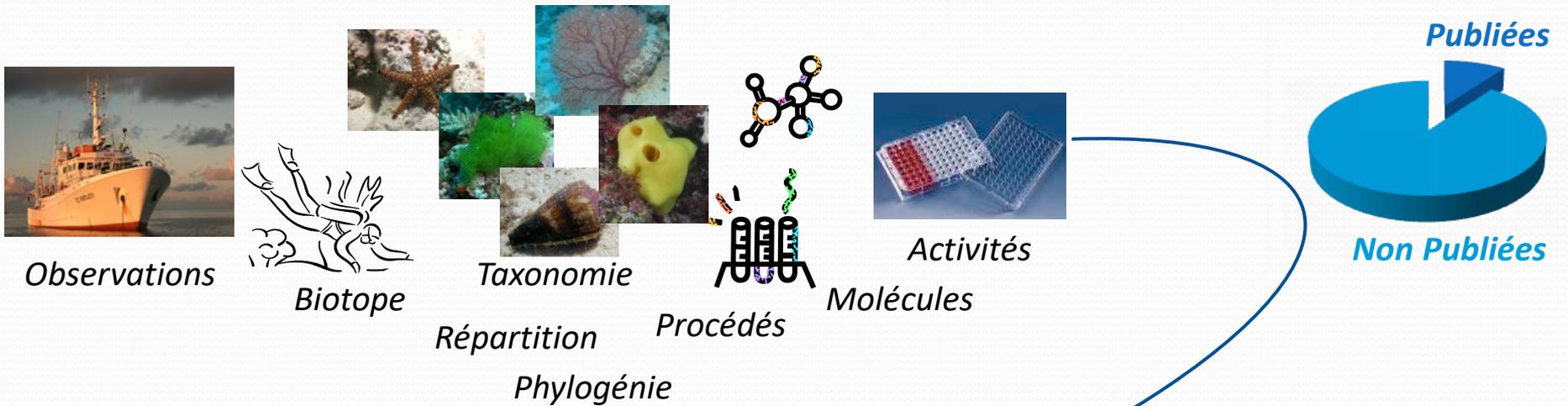
Adrien CHEYPE

Ingénieur en développement logiciel

Pôle « Informatique Scientifique et Appui aux Partenaires du Sud »

IRD-DDUNI Nouméa

Constat de départ



Travaux pluridisciplinaires
Collaborateurs multiples



Hétérogénéité
des supports, des formats,
des données



Problèmes

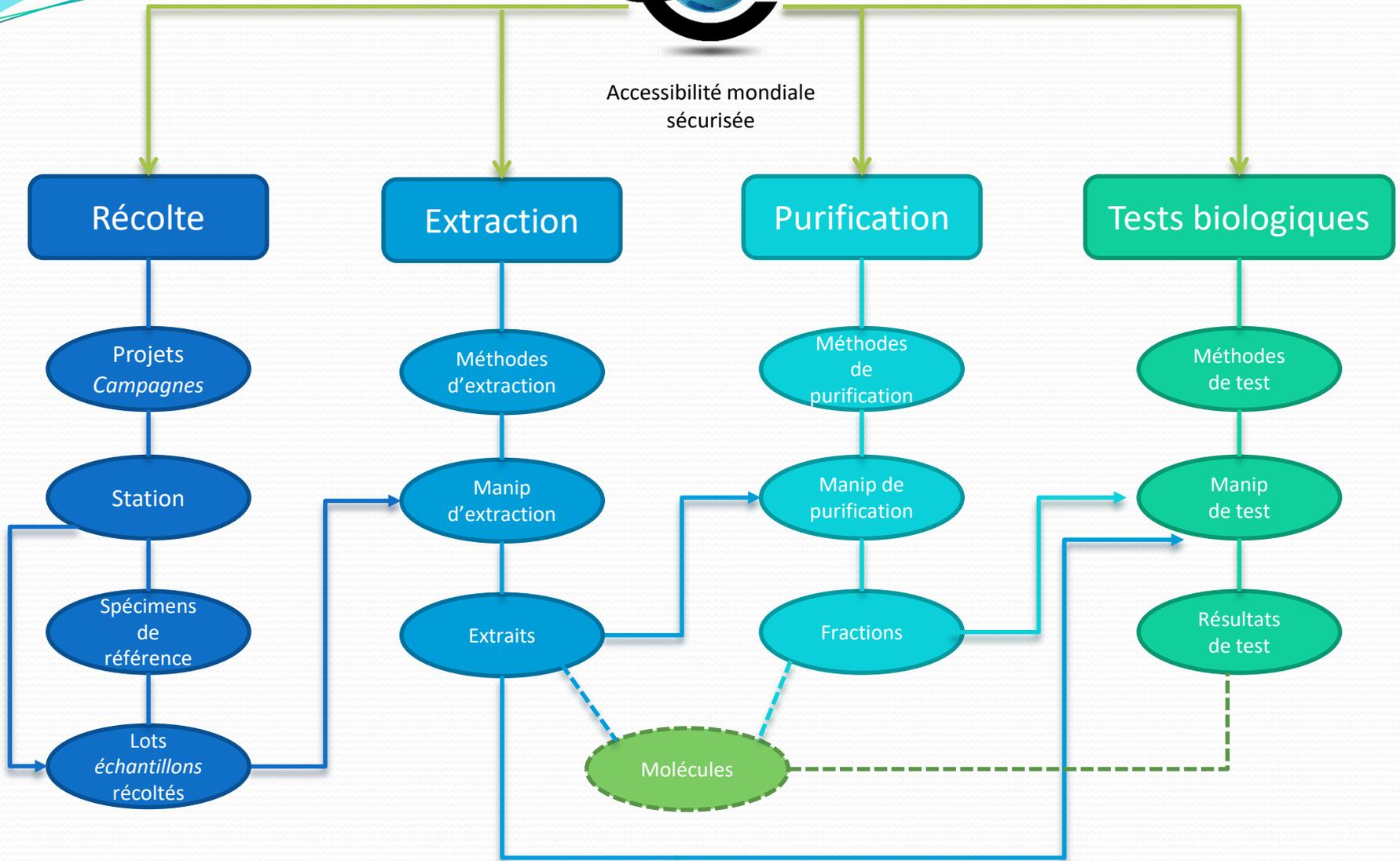
- Actualiser
- Accéder/partager les données
- Recouper, analyser
- Pérenniser

Objectifs

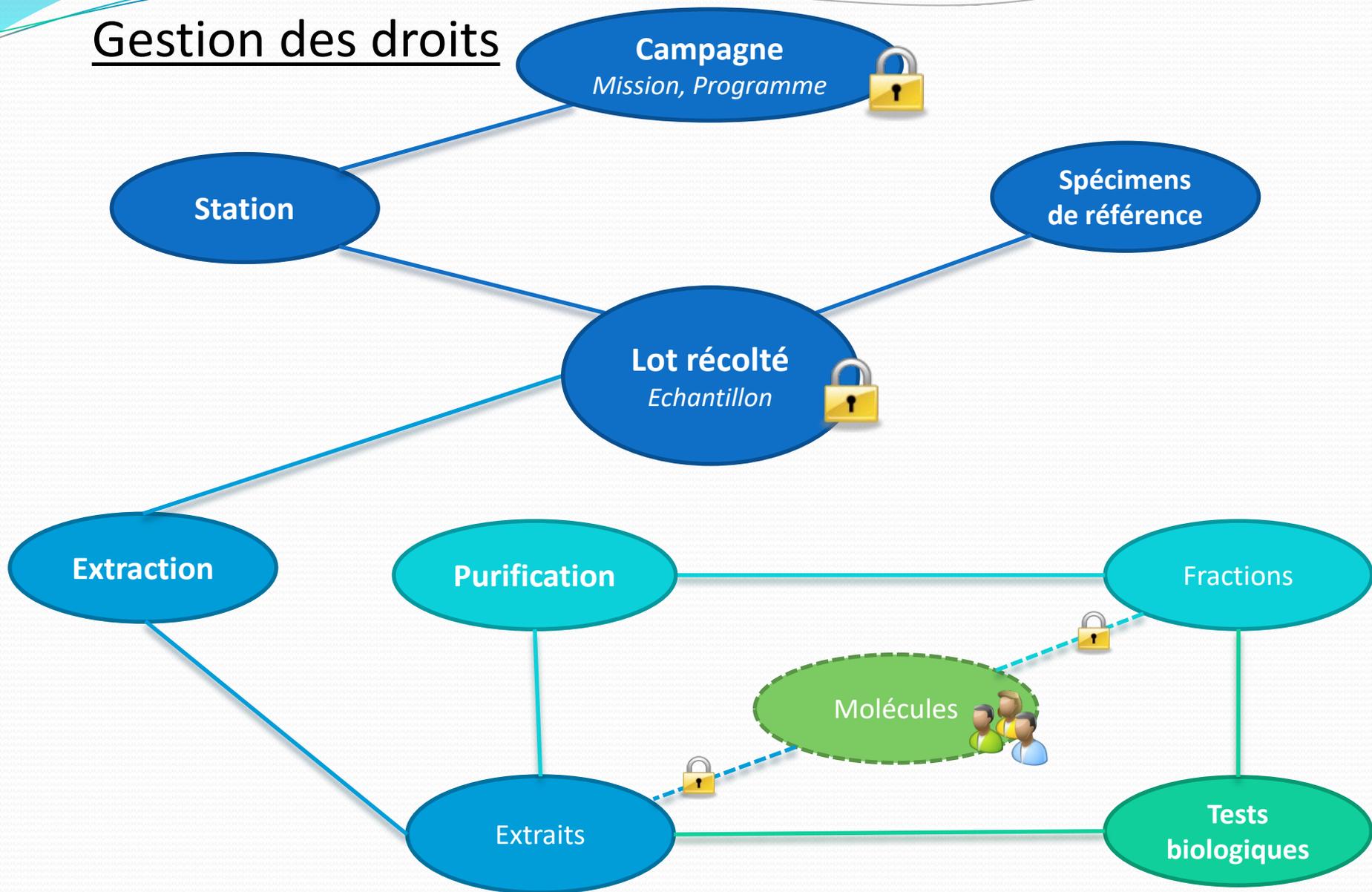
- Capitaliser et pérenniser les données sur le long terme
- Améliorer le travail collaboratif
- Assurer une traçabilité des échantillons de la récolte à la molécule
- Optimiser la gestion des données
- Partager les données de manière contrôlée
- Diffuser les travaux auprès des pays, collectivités prospectés → Démarche APA
- Distribuer l'outil en tant que logiciel à part entière



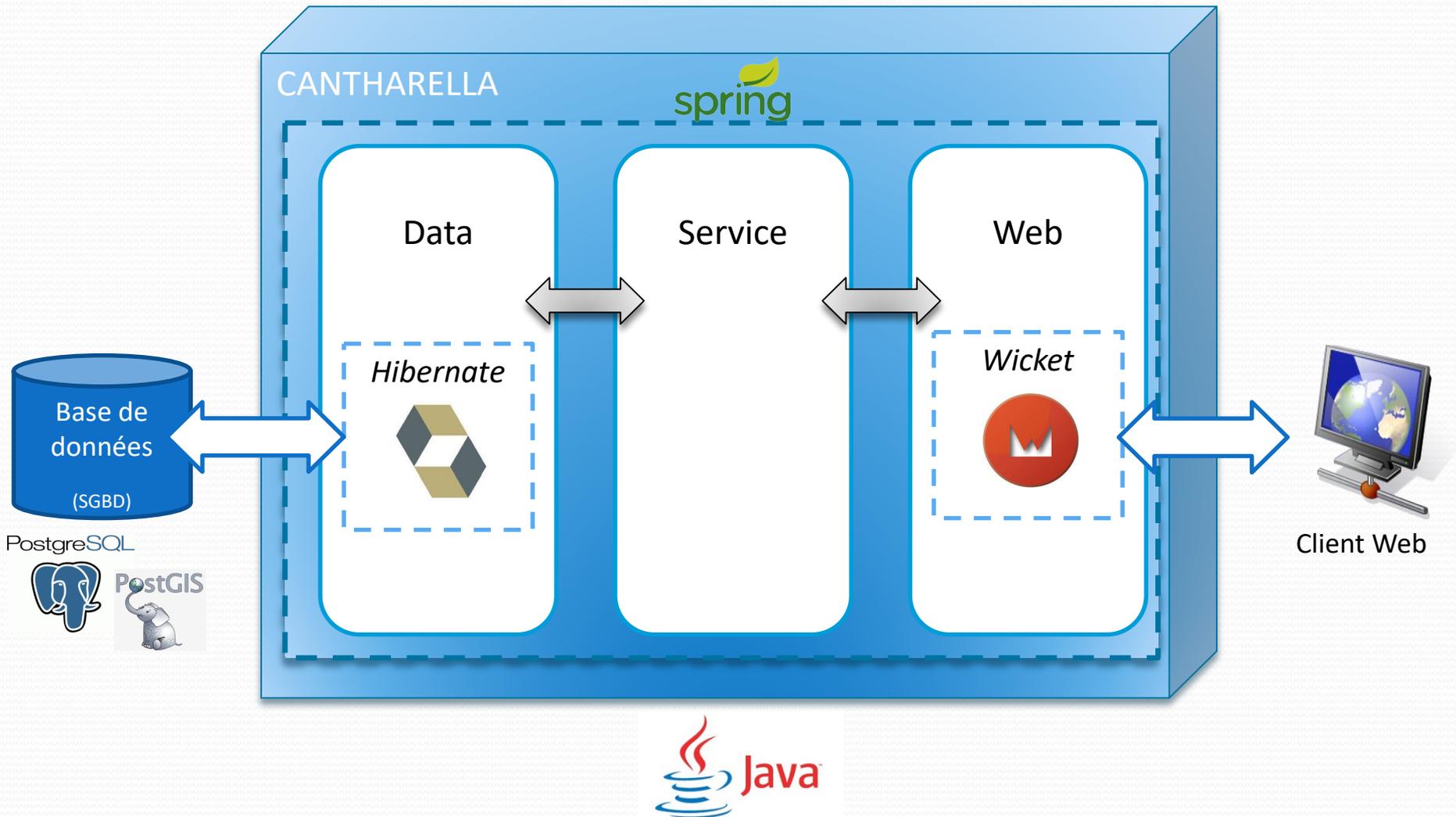
Accessibilité mondiale
sécurisée



Gestion des droits



Technologie informatique « Open Source »



➔ Diffusion du logiciel sous licence libre (Affero GPL)



CANTHARELLA
Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes



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 [\(i\)](#) 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>

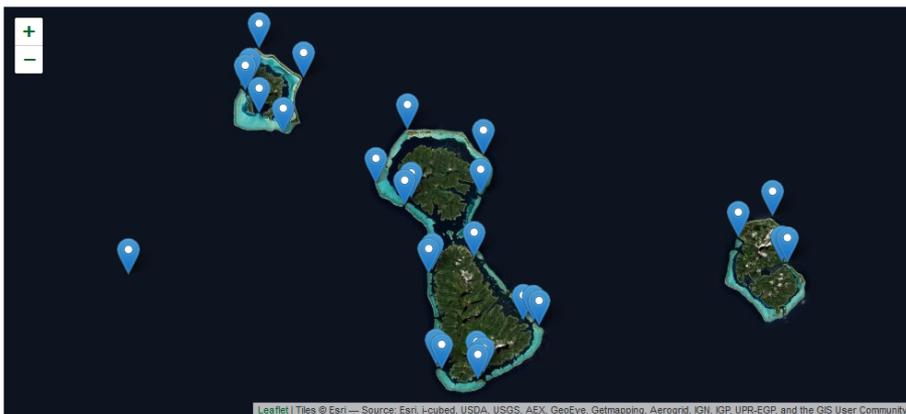
Complément
 Cette campagne a pour objectif d'échantillonner le benthos animal des îles hautes de la Polynésie Française, les îles de la Société et les îles Marquises, dans le double but d'une étude de la répartition géographique de la biodiversité dans le Pacifique, en particulier des spongiaires, et 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

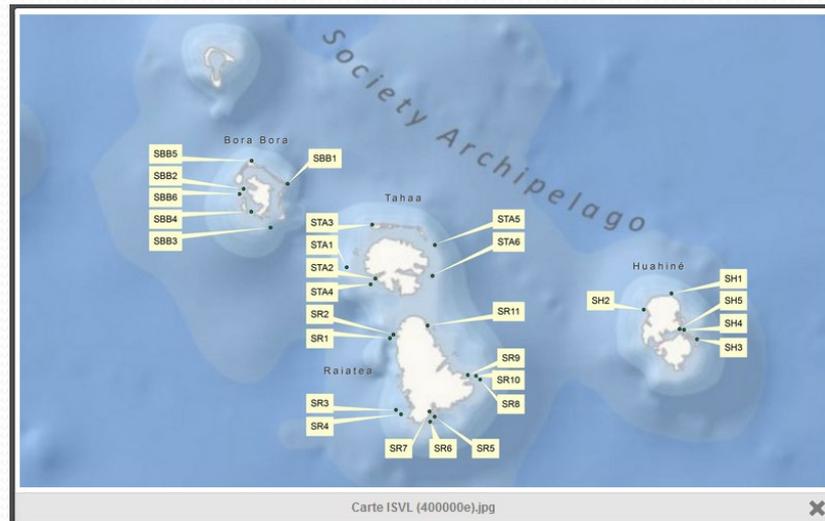
Personne	Complément
Cecile DEBITUS	Chef de mission, récolte, échantillonnage, rapport
Eric FOLCHER	Resp. Hyperbare, récolte, photo, description organismes et stations
Joel OREMPULLER	Récolte, photo
John BUTSCHER	Récolte, sécurité, resp. gonflage
Andre PHAM	Récolte, échantillonnage
Nicolas MAIHOTA	Récolte, 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 Pahiire	16°26.240'S	151°45.208'W
SBB6	Polynésie française	Société - Bora Bora - Récif Papapi	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 LECHELLIER	Tous
Cecile DEBITUS	Tous
Eric FOLCHER	Tous
Joel OREMPULLER	Tous
Dirk ERPENBECK	Tous
Celine MORIOU	Tous

[Modifier](#) [Supprimer](#) [Retour](#)



CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

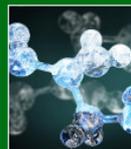
Echantillonnage



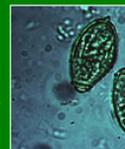
Traitements



Chimie



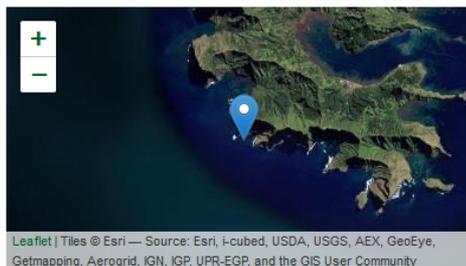
Biologie



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 cotière
 Morphologie du site: pente moyenne
 Substrat: Roche sable



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](#)

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 grossier 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 mathiei (1) 24m photo
 Mollusques:
 Autres :

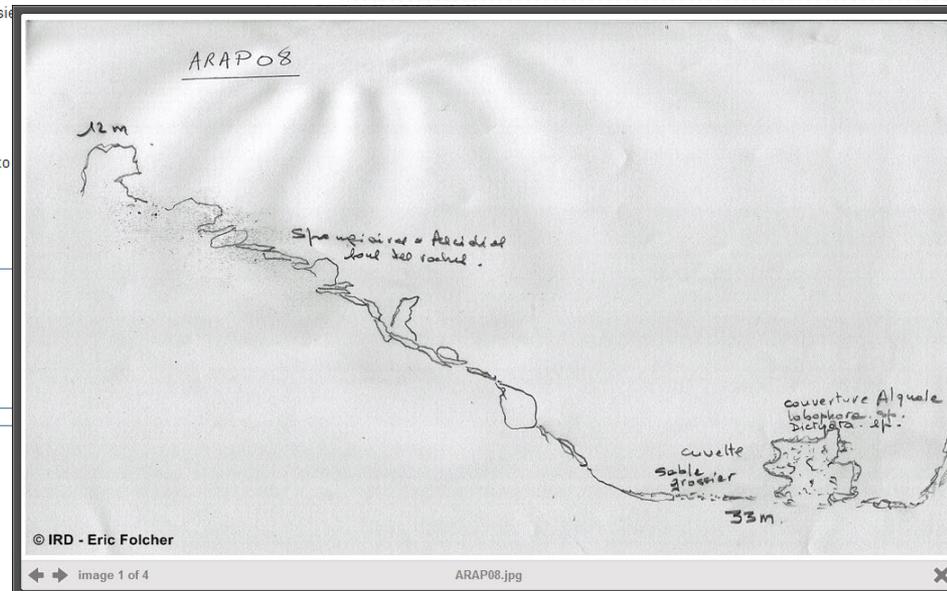
Créateur [Sylvain PETEK](#)

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	





CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

Echantillonnage



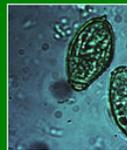
Traitements



Chimie



Biologie



Consultation d'un spécimen

Choix de la langue : Français English

Référence P104

Embranchement *Porifera*

Famille *Aplysiniellidae*

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

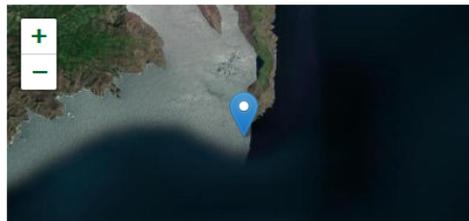
Créateur [Sylvain PETEK](#)

Dépôt

Numéro G331077

Date -

Lieu Queensland Museum, Brisbane, Australie



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](#)



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](#)



CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

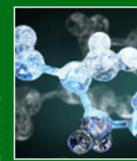
Echantillonnage



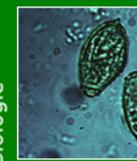
Traitements



Chimie



Biologie



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 Macération 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 évaporé pour délivrer l'extrait sec DM.

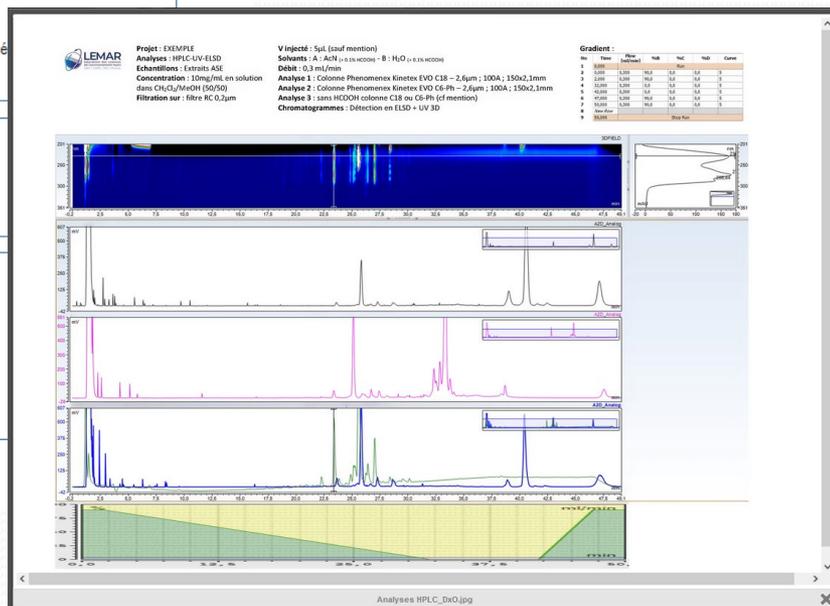
Extraits

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](#)





CANTHARELLA
Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

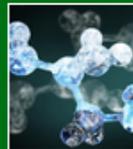
Echantillonnage



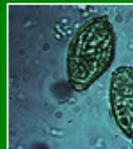
Traitements



Chimie



Biologie



Choix de la langue : Français English



**Institut de Recherche
pour le Développement**
FRANCE

Consultation d'une purification

Réf. purification **MANIP08**
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**

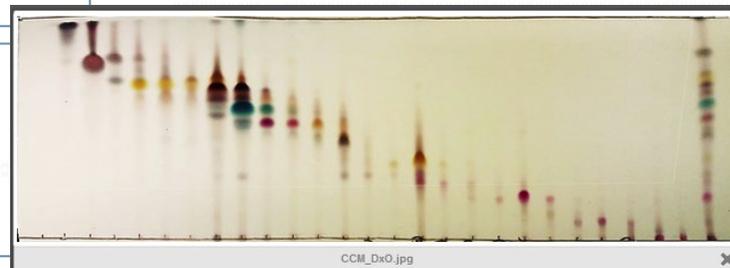
Paramètres	PHASE_STATIONNAIRE <input type="text"/>	Silice
GRANULOMETRIE <input type="text"/>	40-80	
MASSE <input type="text"/>	75	
DIAMETRE <input type="text"/>	50	
SOLVANT_A <input type="text"/>	Cyclohexane	
SOLVANT_B <input type="text"/>	AcOEt	
SOLVANT_C <input type="text"/>	DCM	
SOLVANT_D <input type="text"/>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

Fractions

N° de fraction	Réf. fraction	Masse obtenue (en g)	Rendement
1	ECH10-F01	0,0250	1 %
2	ECH10-F02	0,0380	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	





CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

Echantillonnage



Traitements



Chimie



Biologie



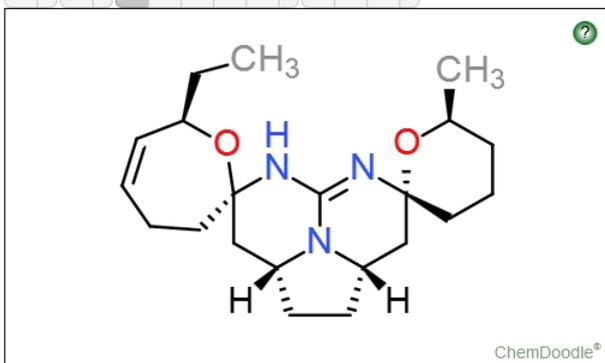
Gestion d'une molécule

Choix de la langue : Fr Français En English

Nom commun

Famille Chimique

Formule développée



Nom IUPAC

* Formule brute

* M (g/mol)

Complément

* Créateur de la fiche

Provenance



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

Document(s) attaché(s)

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

[Joindre un nouveau document](#)

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

Fichier Edition Affichage Fenêtre Aide

1 / 4 78,2%

Outils Signer Commentaires

J. Nat. Prod. 2000, 63, 193-196 193

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

J. C. Braekman,¹ D. Daloz,¹ R. Tavares,¹ E. Hajdu,² and R. W. M. Van Soest¹

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 Indústria Química, 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 20049-040, 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 (5,6,8b)-triazaperhydroacnaphthylene skeleton. Their structures have been determined by detailed spectroscopic analysis. Dehydrobatzelladine C (1) has been isolated from *M. arbuscula* and crabescidins 359 (2) and 431 (3) from *M. urguculata*. The chemotaxonomic implications of these findings are discussed.

Results and Discussion

In a recent paper,¹⁰ we reported the isolation of crabescidin 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 C₂₁H₃₃N₃O₂ [(M + H)⁺ at m/z 487.3711 by positive HR/MS]. An intense fragment peak at m/z 373.2796 (C₁₂H₁₅N₂O₂) revealed the loss from the molecular ion of 113 Da, corresponding to a molecule of 4-guanidino-1-butene, also observed in batzelladine C⁶ and resulting from a McLafferty rearrangement. This was confirmed by the presence of an intense peak at m/z 114 (C₄H₇N) corresponding to a protonated molecule of 4-guanidino-1-butene. Complete assignments of the ¹H and ¹³C NMR spectra were performed using 1D and 2D NMR experiments (¹H-¹H COSY, HMQC, HMBC, NOESY) and are reported in Table 1. The molecule has eight degrees of unsaturation and, because the ¹³C NMR data require one C=C double bond (δc 167.0 and 112.8), one ester carbonyl (δc 164.5), and three C=N bonds (δc 152.5, 158.8, and 181.4), it must contain three rings. The close relationship between the ¹³C NMR and UV spectrum (λ_{max} at 206, 258, and 303 nm) of 1 and those of crabescidin² 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 crabescidin¹¹ 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 ¹H 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-7) of the heptyl side chain (δ 1.84 and 1.64). On the other hand, a correlation between C-15 (δc 181.4) and the hydrogen atoms of the two first methylene groups of the pentyl side chain (H-16, δ 3.06) and the H₂C-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

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 *Hémimycale* sp., several alkaloids possessing the unique (5,6,8b)-triazaperhydroacnaphthylene system have been reported from four other marine sponge samples: crabescidins 800, 816, 830, and 844; isocrabescidin 800; and crabescidin, from several samples of the Mediterranean sponge *Crambe crambe*;²⁻⁴ crabescidin 800; from a Brazilian specimen of *Monanchora arbuscula*;⁵ ptilomycalin A, crabescidins 800 and 816, and batzelladines A-E from *Batzella* sp.⁶ collected in the Bahamas; and batzelladines F-1 from another *Batzella* sp. collected in Jamaica.⁷ Interestingly, Palagiano et al. reported recently the puzzling discovery of the same type of compounds (crabescidin 800, ptilomycalin A, celeromycalin, and fromiamycalin) from two New Caledonian starfish, *Celerina befferiani* and *Frosina moalis*.⁸ Many of these cyclic guanidine derivatives show noteworthy biological activities (e.g., HIV gp120-human CD4-binding inhibition,⁹ p56^{lck}-CDM dissociation induction,⁷ Ca²⁺ channel blocker activities,² cytotoxicity,⁸ and anti-inflammatory and antimicrobial activities⁹).

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. urguculata*, was investigated. This led to the isolation of two new cyclic guanidine alkaloids bearing the (5,6,8b)-triazaperhydroacnaphthylene skeleton, crabescidin 359 (2) and crabescidin 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 salts rather than those of the free bases.

* To whom correspondence should be addressed. Tel: 32.2.6502691. Fax: 32.2.6502708. E-mail: j.v.brakman@uhb.ac.be

¹ University of Brussels.
² INETI, Portugal.
³ University of Sao Paulo.
⁴ University of Amsterdam.

10.1021/mp990403g CCC: \$19.00 © 2000 American Chemical Society and American Society of Pharmacognosy
Published on Web 01/19/2000



CANTHARELLA

Base de données pharmacochimiques des substances naturelles

Configuration
Personnes

Echantillonnage



Traitements



Chimie



Biologie



Choix de la langue : Français English

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 $[(1 - OD_{490} \text{ traitées} / OD_{490} \text{ contrôle}) \times 100]$ 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%



CANTHARELLA
Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes



Recherche

Choix de la langue : FR Français EN 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 [syntaxe complète](#).

Requête

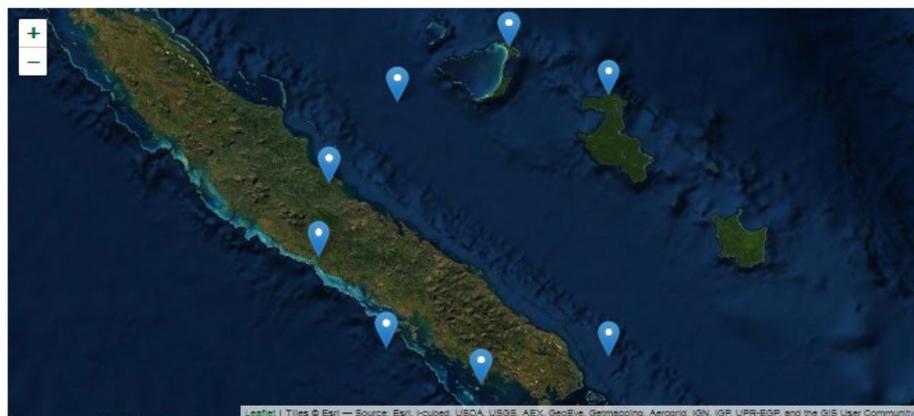
Requête

Pays

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°28.090'S	168°38.087'E
NC03	Nouvelle-Calédonie	Ouvéa Large	20°44.413'S	168°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 Peroée	21°36.401'S	165°28.849'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	168°28.208'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	australocaledonicum	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	australocaledonicum		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 : 2,58
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-KE	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	australocaledonicum	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 2	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	australocaledonicum	ECH13	Démo
4		Caffeine	Alcaloïde	C8H10N4O2	194,19	non	Plantae	Coffea	arabica	ECH03	Démo
1		Giroline	Amino Imidazole	C8H11ClN4O	190,63	oui	Porifera	Cymbastela	cantharella	ECH10	Démo



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 [syntaxe complète](#).

Requête

Requête

Type de document **Faites votre choix**

Bornes de latitude **Faites votre choix**

Bornes de longitude **Faites votre choix**

Rechercher

- 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

Type	Aperçu
Demande ou Autorisation de prélèvement	

Titre	Type	Aperçu
Site	Photo ambiance	
Ambiance	Photo ambiance	

Exporteur 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	

Exporteur en Zip

Extractions

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

Exporteur 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	

Exporteur 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	

Exporteur en Zip

Molécules

N°	Nom commun	Famille Chimique	Formule brute	M. (g/mol)	Titre	Type	Aperçu
1	Girolline	Amino Imidazole	C8H11CIN4O	190,631	Prediction RMN 13C	RMN 13C	
1	Girolline	Amino Imidazole	C8H11CIN4O	190,631	Prediction RMN 13C	RMN 13C	
1	Girolline	Amino Imidazole	C8H11CIN4O	190,631	Prediction RMN 1H	RMN 1H	
1	Girolline	Amino Imidazole	C8H11CIN4O	190,631	Prediction RMN 1H	RMN 1H	
1	Girolline	Amino Imidazole	C8H11CIN4O	190,631	Prediction MSMS	SM	
1	Girolline	Amino Imidazole	C8H11CIN4O	190,631	Prediction MSMS	SM	
1	Girolline	Amino Imidazole	C8H11CIN4O	190,631	Synthèse de la Girolline	Bibliographie	

Exporteur en Zip



CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique des substances naturelles

Configuration
Personnes

Echantillonnage



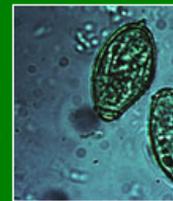
Traitements



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



Instance Cantharella de l'IRD quelques chiffres

→ Opérationnelle depuis 2010

▪ Nb d'utilisateurs: 165 *(241 acteurs)*

→ Nb de projets / campagnes gérés: 35

▪ Nb de stations : 865

▪ Nb de spécimens de référence: 1280

▪ Nb d'échantillons: 3221

▪ Nb d'extractions: 1168

▪ Nb de purifications: 121

▪ Nb de tests biologiques: 9527

▪ Nb de molécules: 109

▪ Nb de documents 1653

→ Pays / territoires prospectés: 10

→ 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*)

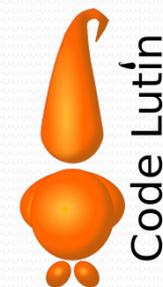
Code Lutin - Nantes

- 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*)
-





CANTHARELLA

Base de données pharmacochimique
des substances naturelles

Notre 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>

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 »