

Bases de datos latinoamericanas de productos naturales como fuente de compuestos bioactivos

Latin American natural product databases as sources of bioactive compounds

Alejandro Gómez-García

Universidad Nacional Autónoma de México, México

alex.go.ga21@hotmail.com

 <https://orcid.org/0000-0003-4444-8221>

Recepción: 17 de abril de 2024

Aprobación: 7 de agosto de 2024



José L. Medina-Franco*

Universidad Nacional Autónoma de México, México

medinajl@unam.mx

 <https://orcid.org/0000-0003-4940-1107>

RESUMEN

Los productos naturales son la mayor fuente de moléculas bioactivas. En el ámbito mundial han sido publicadas bases de datos de productos naturales aislados y caracterizados en determinadas regiones geográficas. Una aplicación práctica de estas bases de datos es el diseño de fármacos asistido por computadora (DIFAC). De acuerdo con lo anterior, se muestra de manera general la significancia de las bases de datos moleculares de productos naturales enfocándose en el DIFAC. A partir de una revisión bibliográfica exhaustiva, se exponen ejemplos de bases de datos moleculares publicadas alrededor del mundo y se muestra el estado del arte actual en el desarrollo de este rubro en Latinoamérica.

PALABRAS CLAVE: bases de datos moleculares, diseño de fármacos asistido por computadora, moléculas bioactivas, productos naturales, quimioinformática.

ABSTRACT

Natural products are the largest source of bioactive molecules. Databases of NPs isolated and characterized in certain geographical areas have been published around the world. One practical application of these databases is the computer-aided drug design (CADD). The scope of this article is to discuss an overview of the significance of molecular natural product databases, focusing on CADD. Based on an exhaustive bibliographic review, examples of molecular databases published around the world are presented, and the current state of the art in the development of this field in Latin America is shown.

KEYWORDS: compound databases, computer-aided drug design, bioactive molecules, natural products, chemoinformatics.

INTRODUCCIÓN

Los productos naturales (PNs) pueden definirse como sustancias producidas por seres vivos, y siempre han sido la mayor fuente de moléculas bioactivas (Cragg y Newman, 2013). Históricamente, han sido empleados como agentes terapéuticos; ejemplo de ello son los que se utilizan como tratamiento para el cáncer. Entre 1946 y 1980, alrededor del mundo fueron aprobados 75 fármacos para tratar esta enfermedad, de los cuales 53% fueron productos inalterados o derivados de productos naturales. Asimismo, entre 1981 y 2019, de los 185 fármacos aprobados para tratar el cáncer, 64.9% corresponden a productos naturales inalterados y derivados de productos naturales (Newman y Cragg, 2020).

Existen distintas fuentes de moléculas bioactivas, entre las cuales se encuentran los animales marinos, hongos, bacterias y las plantas (Tiwari y Bae, 2022). También, las sustancias endógenas producidas por los humanos y animales son una fuente de compuestos bioactivos (Zhang *et al.*, 2020). Asimismo, el veneno producido por diferentes animales es otra valiosa fuente de moléculas bioactivas (Figueiredo Bordon *et al.*, 2020).

*AUTOR PARA CORRESPONDENCIA

medinajl@unam.mx

Hoy en día, se buscan compuestos bioactivos a partir de productos naturales, que puedan ser empleados como punto de partida para el desarrollo de nuevos fármacos para tratar enfermedades infecciosas: antibacterianos (Mohan *et al.*, 2022), antiprotazoarios (Llurba-Montesino y Schmidt, 2018), antifúngicos (Heard *et al.*, 2021) y antivirales (Yi *et al.*, 2020). Además, los productos naturales son empleados en la química farmacéutica para desarrollar nuevos tratamientos contra diversas enfermedades, por ejemplo las neurodegenerativas (Maitra *et al.*, 2022), cáncer (Siddiqui *et al.*, 2022) o las relacionadas con el sistema inmunológico (Wainwright *et al.*, 2022), hepáticas (Beyoğlu e Idle, 2020) y renales (Chen *et al.*, 2018), por mencionar algunas. Asimismo, durante el brote pandémico de SARS-CoV-2 (Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2) se identificaron moléculas bioactivas a partir de productos naturales que pueden servir como prototipo para el desarrollo de fármacos para tratar esta enfermedad (Ebob *et al.*, 2021; Vougianniopoulou *et al.*, 2021).

América Latina contiene al menos un tercio de la biodiversidad global (Raven *et al.*, 2020); por lo tanto, es una gran fuente de moléculas bioactivas, que están contenidas en diversas bases de datos (figura 1) y que podrían ser empleadas en el desarrollo de nuevos fármacos (figura 2).

Este manuscrito discute la importancia de los productos naturales como fuente de moléculas bioactivas, la relevancia de las bases de datos de compuestos químicos y el papel de la quimioinformática en el proceso de descubrimiento de nuevos fármacos. Finalmente, se revisa el estado del arte en el desarrollo de las bases de datos latinoamericanas de productos naturales y sus aplicaciones prácticas en el descubrimiento de fármacos.

1. BASES DE DATOS MOLECULARES

Hasta la fecha, el proceso de descubrimiento de más de setenta fármacos comercializados ha incluido el uso racional de al menos un método computacional (Sabe *et al.*, 2021). El diseño de fármacos asistido por computadora (DIFAC) tiene el potencial de reducir el tiempo y costos del proceso de desarrollo de medicamentos. Las bases de datos moleculares son un valioso recurso para el DIFAC. Una base de datos es una colección organizada de datos en cualquier campo de conocimiento (Masic y Ferhatovica, 2012). Al respecto, es primordial resaltar su importancia como punto de partida para organizar la información. Dentro del área de la química, dependiendo de la información que almacenen, las bases de datos se dividen en seis categorías (tabla 1) (Yang *et al.*, 2019).

TABLA 1
Categorías de las bases de datos moleculares según la información almacenada

Categoría	Contenido	Ejemplos
Información química	Espectros de estructuras químicas y cristalinas	ChemSpider
	Reacciones y síntesis	ChEBI
	Datos termodinámicos	Chemical Universe Database GDB
Bioactividad	Constante de inhibición	PubChem
	Constante de disociación	ChEMBL
	Concentración inhibitoria media máxima	BindingDB
	Concentración efectiva media máxima	ChemBank PDBbind
Fármacos	Datos detallados de fármacos	DrugBank
	Información sobre dianas farmacológicas	
Productos naturales	Estructuras moleculares	Universal Natural Product Database
		MeFSAT
		Natural Product Atlas
Disponibilidad química	Disponibilidad comercial	ZINC
		NCI
Fragmentos	Estructuras	FDB-17
	Información fisicoquímica	Fragment Store
	Sitios de unión preferentes	PADFrag

Fuente: modificado de Yang *et al.* (2019).

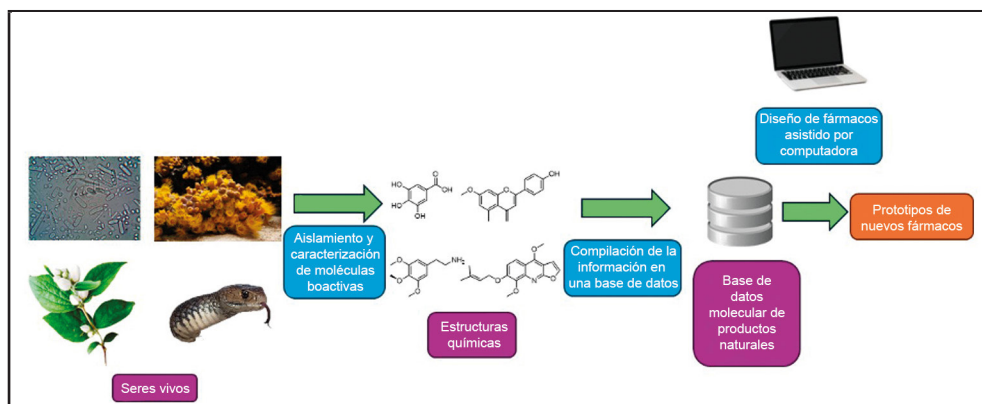


FIGURA 1

Elaboración de bases de datos moleculares de productos naturales

Fuente: elaboración propia.

Nota: representación gráfica del proceso que se lleva a cabo para construir una base de datos molecular de productos naturales y su aplicación dentro del área del diseño de fármacos asistido por computadora.

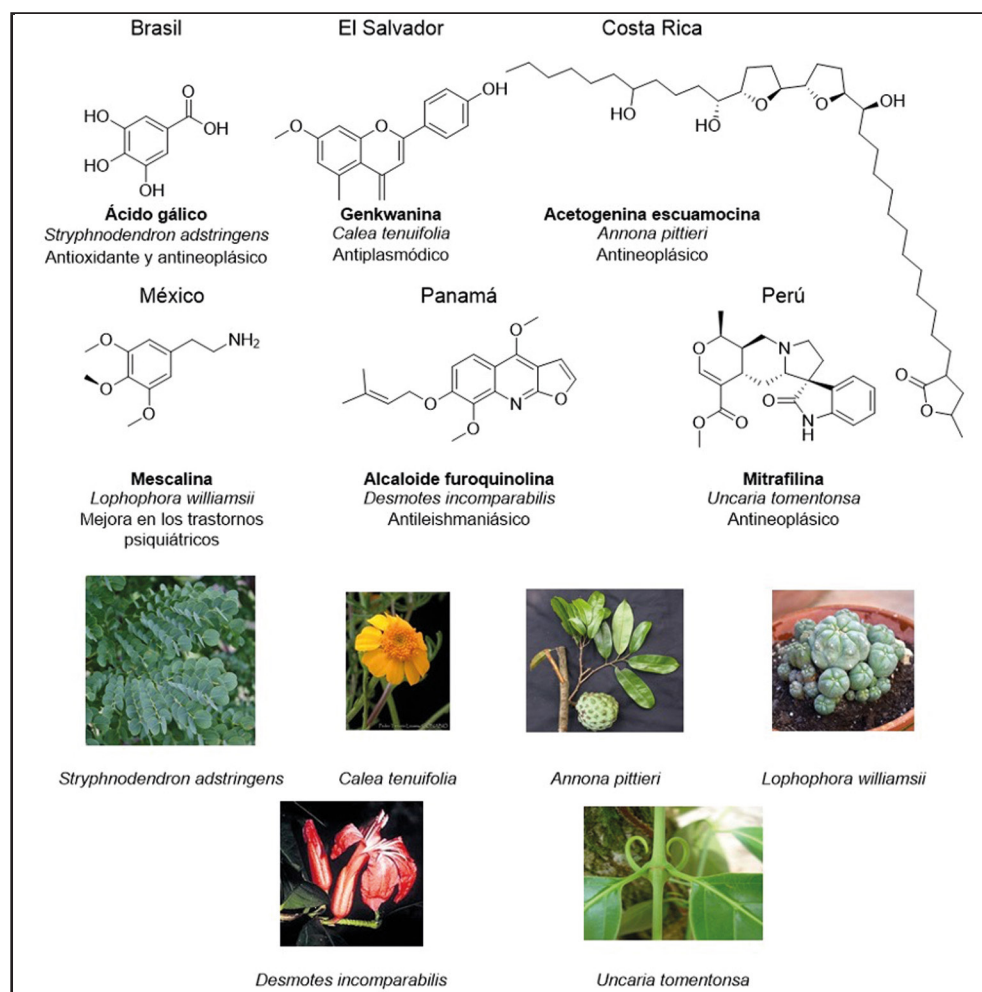


FIGURA 2

Compuestos bioactivos representativos de países latinoamericanos

Fuente: elaboración propia.

Nota: compuestos bioactivos producidos por plantas medicinales representativas de países latinoamericanos y algunos de sus efectos terapéuticos descritos en la literatura..

Por otra parte, es posible identificar compuestos bioactivos con actividad terapéutica con la ayuda de métodos quimioinformáticos (Martínez-Mayorga *et al.*, 2020). En este sentido, la quimioinformática se define como la aplicación de métodos informáticos para resolver problemas químicos (Gasteiger y Funatsu, 2006). Las bases de datos moleculares proporcionan acceso a cientos, miles e incluso millones de compuestos. Mediante distintos métodos quimioinformáticos es posible predecir cuáles de ellos son candidatos para tratar una determinada enfermedad (Yang *et al.*, 2019).

En esta línea, el cribado virtual consiste en la identificación de compuestos bioactivos en bases de datos moleculares. Las metodologías de cribado virtual se suelen dividir en dos categorías: cribado virtual basado en la estructura (CVBE) y cribado virtual basado en el ligando (CVBL). El CVBE es preferible cuando es conocida la estructura tridimensional de la proteína con la cual se pretende que interactúe el compuesto bioactivo. En caso de no conocerse la estructura tridimensional de la proteína de interés, se opta por predecirla mediante una metodología llamada *modelado por homología*. Los métodos de CVBE permiten predecir cómo es la interacción de una molécula bioactiva con la proteína de interés. Por otro lado, se suele recurrir al CVBL cuando la estructura de la proteína es desconocida. En el CVBL se asume que las moléculas estructuralmente similares tendrán una actividad biológica similar. En el CVBL se encuentran los estudios de “relación cuantitativa estructura-actividad”, los cuales pretenden identificar una relación matemática entre la estructura de la molécula y la actividad biológica (Kar y Roy, 2013).

2. BASES DE DATOS DE PRODUCTOS NATURALES

La naturaleza es una fuente rica de moléculas bioactivas que sirven como agentes terapéuticos. Además, la naturaleza es una fuente de compuestos con una gran diversidad estructural en comparación con las pequeñas moléculas de origen sintético (Saldívar-González y Medina-Franco, 2020). Hay bases de datos de productos naturales de acceso abierto y comerciales (tabla 2). Entre 2000 y 2019 se publicaron 123 bases de datos de productos naturales. De ellas, 98 aún son accesibles, 92 son de acceso abierto y solo 50 contienen estructuras moleculares que pueden ser empleadas en análisis quimioinformáticos (Sorokina y Steinbeck, 2020). COCONUT 2.0 (Chandrasekhar *et al.*, 2025) es una de las bases de datos más grandes de productos naturales de acceso abierto y contiene más de 720 000 compuestos recopilados de 50 bases de datos de productos naturales de acceso abierto. La base de datos universal de productos naturales (Gu *et al.*, 2013) es una recopilación que trata de reunir todos los productos naturales conocidos, la cual cuenta con más de 213 000. Proporciona estructuras 3D con información estereoquímica y descriptores moleculares calculados. En este momento, es accesible en el sitio web de ISDB (s. f.). SuperNatural 3.0 (Gallo *et al.*, 2023) contiene más de 325 000 productos naturales e incluye información sobre estructuras 2D, propiedades fisicoquímicas, predicción de la toxicidad y proveedores comerciales.

TABLA 2
Bases de datos representativas de productos naturales

Base de datos	Número de compuestos	Accesibilidad	Referencias
COCONUT 2.0	721 902	acceso abierto	Chandrasekhar <i>et al.</i> , 2025
Base de datos universal de productos naturales	~213 000	acceso abierto	Gu <i>et al.</i> , 2013
SuperNatural 3.0	449 048	acceso abierto	Gallo <i>et al.</i> , 2023
Diccionario de productos naturales	~230 000	comercial	CHEMnetBASE, s. f.
Scifinder	~300 000	comercial	Gabrielson, 2018
TCMBank	61 966	acceso abierto	Lv <i>et al.</i> , 2023
IMPPAT	~10 000	acceso abierto	Mohanraj <i>et al.</i> , 2018
AfroDB	~1 000	acceso abierto	Ntie-Kang <i>et al.</i> , 2013
Phyto4Health	3 128	acceso abierto	Ionov <i>et al.</i> , 2023

Fuente: elaboración propia.

Existen diversas aplicaciones prácticas de las bases de datos de productos naturales, tal es el caso de la desreplicación (el proceso de selección de extractos/compuestos activos para identificar y eliminar aquellos compuestos que se han estudiado en el pasado) (Zani y Carroll, 2017), el diseño de pseudoproductos naturales (moléculas novedosas que resultan de la combinación sin precedentes de fragmentos de productos naturales, la estructura molecular resultante no puede ser sintetizada por la naturaleza) y en el campo de la ecología, por mencionar ejemplos representativos (Reich y Labes, 2017).

3. BASES DE DATOS DE PRODUCTOS NATURALES LATINOAMERICANAS

En la última década se han hecho públicas bases de datos de productos naturales aislados y caracterizados en Latinoamérica. Los compuestos hallados en estas bases de datos son procedentes de plantas, microorganismos, hongos, propóleos, animales marinos y terrestres (tabla 3). Brasil (SistematX: 9 514 y NuBBE: 2 223) y México (UNIIQUIM: 1 112 y BIOFACQUIM: 750) son los países que cuentan con las bases de datos con mayor número de compuestos. También, grupos de investigación en Costa Rica y Colombia han construido sus propias bases de datos de productos naturales. A partir de las bases de datos de productos naturales latinoamericanos se han identificado más de noventa y dos moléculas bioactivas con posible aplicación terapéutica en varias áreas y podrían servir como prototipo para el desarrollo de nuevos fármacos (tabla 4). A mediados de 2022, se inició un proyecto para unificar y estandarizar a las bases de productos naturales de Latinoamérica en una única base: Latin American Natural Product Database (LANaPDB) (Gómez-García *et al.*, 2023). La primera versión de LANaPDB contiene 12 959 compuestos provenientes de nueve bases de datos de seis países latinoamericanos. A principios de 2024, se publicó el artículo, se publicó la preimpresión del artículo revisado por pares en donde se reporta la segunda versión de LANaPDB, la cual contiene 619 nuevos compuestos (13 578 compuestos en total) (Gómez-García *et al.*, 2024). En la segunda versión de LANaPDB se incluyó una nueva base de datos compuesta por productos naturales de Colombia: NPDBEjeCol. Además, LANaPDB ha sido actualizada con nuevos compuestos provenientes de otras dos bases de datos de productos naturales: NAPRORE-CR (Costa Rica) y BIOFACQUIM (México). En 2025, LANaPDB ha sido actualizada a su cuarta versión, incluyendo las versiones actualizadas de las bases de datos de productos naturales de Latinoamérica (tabla 3).^[1]

NaturAr está compuesta por productos naturales de Argentina; dentro de la información para consultar está la referente a ciertas propiedades fisicoquímicas calculadas, estructuras 3D y referencias bibliográficas. LAIPNUDELSAV se conforma por productos naturales de El Salvador; originalmente los compuestos no estaban disponibles de manera pública, pero ahora forman parte de LANaPDB, en donde pueden ser consultadas las estructuras de cada compuesto. Hasta este momento, no existe una publicación revisada por pares asociada a LAIPNUDELSAV.

En el caso de Brasil existen tres bases de datos de productos naturales: UEFS, NuBBE y SistematX. Dentro de la información disponible en UEFS, están las propiedades fisicoquímicas calculadas, las dianas biológicas de los compuestos, así como la afinidad de unión (diana biológica-ligando) y referencias bibliográficas (UEFS, s. f.). NuBBE contiene los nombres IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) de los compuestos, propiedades fisicoquímicas calculadas de interés farmacéutico y espectros de resonancia magnética nuclear predichos (Pilon *et al.*, 2017). SistematX, como característica única, contiene las coordenadas geográficas del lugar donde se ubica la planta de donde fue aislado el compuesto. Además, contiene las referencias bibliográficas y ciertas propiedades que fueron predichas: actividad biológica, propiedades fisicoquímicas y espectros de resonancia magnética nuclear (Costa *et al.*, 2021).

Panamá cuenta con la base de datos CIPFMA (en 2025 cambió su nombre a NaProPMA), cuyas estructuras en un inicio no estaban disponibles de manera pública; sin embargo, ya lo están dentro de LANaPDB. Sus compuestos se han sometido a alrededor de 25 ensayos biológicos *in vivo* e *in vitro* dentro de los cuales se destaca la actividad en contra del virus de inmunodeficiencia humana, propiedades antioxidantes y anticancerígenas (A. Olmedo y Medina-Franco, 2019).

En el caso de las bases de datos de productos naturales de México, la Unidad de Informática del Instituto de

Química de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) creó UNIIQUIM, compuesta principalmente por PNs aislados y caracterizados en el Instituto de Química de la UNAM. Dentro de la información que se incluye en cada compuesto se encuentra el nombre IUPAC, propiedades fisicoquímicas, la especie productora, la técnica espectroscópica empleada para caracterizar al compuesto, actividad biológica y la referencia bibliográfica (UNIIQUIM, s. f.). El grupo de investigación de DIFACQUIM (Diseño de Fármacos Asistido por Computadora) de la Facultad de Química en la UNAM creó BIOFACQUIM, cuya primera versión se compone sobre todo de productos naturales aislados y caracterizados entre 2000 y 2018 en esta facultad. Su segunda versión se amplió a productos naturales aislados y caracterizados por grupos de investigación de otras instituciones mexicanas. Entre la información para consulta, está disponible la especie productora del compuesto y su categoría taxonómica, la actividad biológica y el lugar donde se ubica la especie productora (Pilon *et al.*, 2017).

Como ejemplo de aplicación práctica en la identificación de compuestos bioactivos a partir de las bases de datos de productos naturales latinoamericanos, se destaca la identificación de moléculas bioactivas en contra del parásito *Trypanosoma cruzi*. Este parásito causa la enfermedad de Chagas, la cual es común en las regiones tropicales de América Latina. Los investigadores identificaron compuestos con actividad inhibitoria sobre la enzima tripanotona reductasa, esencial para la supervivencia del parásito. A partir de la base de datos de NuBBE, se empleó una técnica de CVBE, llamada *acoplamiento molecular*, en la cual se predijo el modo en el que las moléculas de NuBBE interaccionan con la enzima en su sitio activo. Se identificaron diez compuestos como potenciales moléculas bioactivas en contra de la enfermedad de Chagas (Do Carmo Santos *et al.*, 2019).

TABLA 3
Bases de datos de productos naturales de Latinoamérica

Base de datos	Número de compuestos	País	Fuente	Referencias
NaturAr	1 278	Argentina		Martínez Heredia <i>et al.</i> , 2025
NuBBE	2 223	Brasil	Plantas Microorganismos Animales marinos Animales terrestres	Pilon <i>et al.</i> , 2017
SistematX	9 514	Brasil	Plantas	Costa <i>et al.</i> , 2021
UEFS	503	Brasil	Plantas	UEFS, s. f.
NPDBEjeCol	200	Colombia	Plantas Alimentos derivados de plantas	Rodríguez-Pérez <i>et al.</i> , 2025
NAPRORE-CR	1 161	Costa Rica	Plantas Microorganismos	Acuña-Jiménez <i>et al.</i> , 2025
LAIPNUDELSAV	214	El Salvador	Plantas	*
UNIIQUIM	1 112	México	Plantas	UNIIQUIM, s. f.
BIOFACQUIM	750	México	Plantas Hongos Propóleos Animales marinos	Pilón-Jiménez, Saldívar-González, Díaz-Eufracio <i>et al.</i> , 2019
Nat-UV DB	227	México	Plantas Hongos Animales Chromista	López-López <i>et al.</i> , 2025
NaPropMA	531	Panamá	Plantas	A. Olmedo y Medina-Franco, 2019
PeruNPDB	280	Perú	Animales Plantas	Barazorda-Ccahuana <i>et al.</i> , 2023

Fuente: elaboración propia.

Nota: *no hay una publicación revisada por pares asociada a la actual versión de la base de datos.

TABLA 4
Aplicaciones prácticas de las bases de datos de productos naturales de Latinoamérica

Base de datos	Enfermedad o síntoma	Compuestos identificados	Referencias
NuBBE _{DB}	Enfermedad de Chagas	10	Do Carmo Santos <i>et al.</i> , 2019
	Tuberculosis	13	Antunes <i>et al.</i> , 2021
SistematX	Enfermedad de Chagas	13	Acevedo <i>et al.</i> , 2018
	Leishmaniasis	13	Herrera-Acevedo; Dos Santos Maia <i>et al.</i> , 2021
	Esquistosomiasis	5	Menezes <i>et al.</i> , 2022
	SARS-CoV-2	19	Rodrigues <i>et al.</i> , 2020
	Enfermedad de Alzheimer	2	Herrera-Acevedo; Perdomo-Madrigal <i>et al.</i> , 2021
UNIIQUIM	Dolor	6	Martinez-Mayorga <i>et al.</i> , 2017
BIOFACQUIM	Obesidad	8	Przybyłek, 2020
	Diabetes		
	Hiperlipoproteinemia		
	Cáncer		
	SIDA		
	Hepatitis B y C		
	Enfermedades relacionadas al envejecimiento	3	Barrera-Vázquez <i>et al.</i> , 2021

Fuente: elaboración propia.

Nota: a pesar de que NaProPMA no aparece en la tabla, sus compuestos han sido ensayados en una amplia gama de bioensayos *in vitro* e *in vivo* (A. Olmedo y Medina-Franco, 2019).

PROSPECTIVA

En nuestros días hay proyectos cuya finalidad es continuar con la actualización de algunas de las bases de datos latinoamericanas de productos naturales existentes y un proyecto que pretende unificarlas y estandarizarlas, por lo que se prevé que este rubro continuará enriqueciéndose con más información y podrá aplicarse en el diseño de nuevos fármacos. Además, se anticipa que herramientas quimioinformáticas continuarán contribuyendo tanto a la organización, estandarización, construcción y aplicaciones de las bases de datos de productos naturales en la investigación química.

CONCLUSIONES

Los productos naturales son producidos por una gran variedad de seres vivos y los compuestos bioactivos que se encuentran en ellos han sido empleados para tratar diversas enfermedades o síntomas. Por otro lado, las bases de datos moleculares de productos naturales son herramientas indispensables empleadas para el descubrimiento de nuevos fármacos, mediante el DIFAC. América Latina es una región con una gran biodiversidad y, por tanto, una fuente invaluable de moléculas bioactivas. Diversas universidades latinoamericanas han recopilado y continúan recolectando, estudiando y caracterizando a las moléculas bioactivas en los productos naturales de sus respectivos países. Como resultado, han sido publicadas múltiples bases de datos de productos naturales de países latinoamericanos, cuyo valor es incalculable dentro del área del descubrimiento de nuevos fármacos. En la actualidad, todas las bases de datos de productos naturales de Latinoamérica pueden ser empleadas sin problemas en proyectos de descubrimiento de nuevos fármacos, ya que sus estructuras moleculares están disponibles en formatos reconocidos por los distintos programas de computadora empleados en el DIFAC. Adicionalmente, LANaPDB compila todas las bases de datos latinoamericanas de productos naturales, lo cual facilita el acceso al investigador

a las estructuras moleculares de productos naturales de Latinoamérica, en caso de ser requeridas en un proyecto de descubrimiento de nuevos fármacos.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a los árbitros por sus comentarios y sugerencias que contribuyeron a la mejora del artículo., así como también el apoyo financiero de la DGAPA, UNAM, Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT), proyecto IG200124. Alejandro Gómez García agradece al Consejo Nacional de Humanidades Ciencia y Tecnología (CONAHCYT) por la beca de doctorado otorgada 912137.

REFERENCIAS

- A. Olmedo, D., & Medina-Franco, J. L. (2019). Chemoinformatic approach: the case of natural products of Panama. In *Cheminformatics and its Applications [working title]*. IntechOpen. <https://doi.org/10.5772/intechopen.87779>
- Acevedo, C. H., Scotti, L., & Scotti, M. T. (2018). In silico studies designed to select sesquiterpene lactones with potential antichagasic activity from an in-house asteraceae database. *ChemMedChem*, 13(6), 634-645. <https://doi.org/10.1002/cmdc.201700743>
- Acuña-Jiménez, D. A., Rodríguez-Zúñiga, J., Gutiérrez-Ramírez, D., Quesada-Grosso, R., Conejo-López, V., Arce-Villalobos, K., Zamora, W. J., & Medina-Franco, J. L. (2025). Natural Products Repository of Costa Rica (NAPRORE-CR): An Open-Access Database. *Journal of Chemical Information and Modeling*. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.5c01552>
- Antunes, S. S., Won-Held Rabelo, V., & Romeiro, N. C. (2021). Natural products from Brazilian biodiversity identified as potential inhibitors of PknA and PknB of *M. tuberculosis* using molecular modeling tools. *Computers in Biology and Medicine*, 136, 104694. <https://doi.org/10.1016/j.compbiomed.2021.104694>
- Barazorda-Ccahuana, H. L., Ranilla, L. G., Candia-Puma, M. A., Cárcamo-Rodríguez, E. G., Centeno-Lopez, A. E., Davila-Del-Carpio, G.... & Chávez-Fumagalli, M. A. (2023). PeruNPDB: the Peruvian Natural Products Database for in silico drug screening. *Scientific Reports*, 13(1), 7577. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-34729-0>
- Barrera-Vázquez, O. S., Gómez-Verjan, J. C., & Magos-Guerrero, G. A. (2021). Chemoinformatic screening for the selection of potential senolytic compounds from natural products. *Biomolecules*, 11(3). <https://doi.org/10.3390/biom11030467>
- Beyoğlu, D. e Idle, J. R. (2020). Metabolomic insights into the mode of action of natural products in the treatment of liver disease. *Biochemical Pharmacology*, 180, 114171. <https://doi.org/10.1016/j.bcp.2020.114171>
- Chen, D.-Q., Hu, H.-H., Wang, Y.-N., Feng, Y.-L., Cao, G., & Zhao, Y.-Y. (2018). Natural products for the prevention and treatment of kidney disease. *Phytomedicine: International Journal of Phytotherapy and Phytopharmacology*, 50, 50-60. <https://doi.org/10.1016/j.phymed.2018.09.182>
- Costa, R. P. O., Lucena, L. F., Silva, L. M. A., Zocolo, G. J., Herrera-Acevedo, C., Scotti, L.,... Scotti, M. T. (2021). The sistematX web portal of natural products: An update. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 61(6), 2516-2522. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c00083>
- Chandrasekhar, V., Rajan, K., Kanakam, S. R. S., Sharma, N., Weißenborn, V., Schaub, J., & Steinbeck, C. (2025). COCONUT 2.0: a comprehensive overhaul and curation of the collection of open natural products database. *Nucleic Acids Research*, 53(D1), D634–D643. <https://doi.org/10.1093/nar/gkae1063>

- CHEMnetBASE. (s.f). Chemical. *Dictionary of Natural Products*. Consultado 20 de marzo de 2024. <https://dnp.chemnetbase.com/faces/chemical/ChemicalSearch.xhtml>
- Cragg, G. M., & Newman, D. J. (2013). Natural products: a continuing source of novel drug leads. *Biochimica et Biophysica Acta*, 1830(6), 3670-3695. <https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2013.02.008>
- Do Carmo Santos, N., Da Paixão, V. G., & da Rocha Pita, S. S. (2019). New *Trypanosoma cruzi* Trypanothione reductase inhibitors identification using the virtual screening in database of nucleus bioassay, biosynthesis and ecophysiology (NuBBE). *Anti-Infective Agents*, 17(2), 138-149. <https://doi.org/10.2174/2211352516666180928130031>
- Ebob, O. T., Babiaka, S. B., & Ntie-Kang, F. (2021). Natural products as potential lead compounds for drug discovery against SARS-CoV-2. *Natural Products and Bioprospecting*, 11(6), 611-628. <https://doi.org/10.1007/s13659-021-00317-w>
- Figueiredo Bordon, K. de C., Takeno Cologna, C., Corrêa Fornari-Baldo, E.... & Candiani Arantes, E. (2020). From animal poisons and venoms to medicines: achievements, challenges and perspectives in drug discovery. *Frontiers in Pharmacology*, 11, 1132. <https://doi.org/10.3389/fphar.2020.01132>
- Gabrielson, S. W. (2018). SciFinder. *Journal of the Medical Library Association*, 106(4). <https://doi.org/10.5195/JMLA.2018.515>
- Gallo, K., Kemmler, E., Goede, A., Becker, F., Dunkel, M., Preissner, R., & Banerjee, P. (2023). SuperNatural 3.0-a database of natural products and natural product-based derivatives. *Nucleic Acids Research*, 51(D1), D654-D659. <https://doi.org/10.1093/nar/gkac1008>
- Gasteiger, J., & Funatsu, K. (2006). Chemoinformatics - an important scientific discipline. *Journal of Computer Chemistry, Japan*, 5(2), 53-58. <https://doi.org/10.2477/jccj.5.53>
- Gómez-García, A., Jiménez, D. A. A., Zamora, W. J., Barazorda-Ccahuana, H. L., Chávez-Fumagalli, M. Á., Valli, M.... & Medina-Franco, J. L. (2023). Navigating the chemical space and chemical multiverse of a unified latin american natural product database: lanapdb. *Pharmaceuticals*, 16(10), 1388. <https://doi.org/10.3390/ph16101388>
- Gómez-García, A., Prinz, A.-K., Acuña Jiménez, D. A., Zamora, W. J., Barazorda-Ccahuana, H. L., Chávez-Fumagalli, M. Á.... & Medina-Franco, J. L. (2024). *Profiling the natural product-likeness of Latin American compound libraries*. <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2024-t2bk9>
- Gu, J., Gui, Y., Chen, L., Yuan, G., Lu, H.-Z., & Xu, X. (2013). Use of natural products as chemical library for drug discovery and network pharmacology. *PLOS One*, 8(4), e62839. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0062839>
- Heard, S. C., Wu, G., & Winter, J. M. (2021). Antifungal natural products. *Current Opinion in Biotechnology*, 69, 232-241. <https://doi.org/10.1016/j.copbio.2021.02.001>
- Herrera-Acevedo, C., Dos Santos Maia, M., Cavalcanti, É. B. V. S., Coy-Barrera, E., Scotti, L., & Scotti, M. T. (2021a). Selection of antileishmanial sesquiterpene lactones from Sistemax database using a combined ligand-/structure-based virtual screening approach. *Molecular Diversity*, 25(4), 2411-2427. <https://doi.org/10.1007/s11030-020-10139-6>
- Herrera-Acevedo, C., Perdomo-Madrigal, C., Herrera-Acevedo, K., Coy-Barrera, E., Scotti, L., & Scotti, M. T. (2021b). Machine learning models to select potential inhibitors of acetylcholinesterase activity from Sistemax: a natural products database. *Molecular Diversity*, 25(3), 1553-1568. <https://doi.org/10.1007/s11030-021-10245-z>
- Ionov, N., Druzhilovskiy, D., Filimonov, D., & Poroikov, V. (2023). Phyto4Health: Database of Phytocomponents from Russian Pharmacopoeia Plants. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 63(7), 1847-1851. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.2c01567>

- ISDB. (s. f.). *A database of In-Silico predicted MS/MS spectrum of Natural Products*. Consultado 20 de marzo de 2024. <http://oolonek.github.io/ISDB/>
- Kar, S., & Roy, K. (2013). How far can virtual screening take us in drug discovery? *Expert Opinion on Drug Discovery*, 8(3), 245-261. <https://doi.org/10.1517/17460441.2013.761204>
- López-López, E., Hernández-Segura, A. M., Lara-Cuellar, C., Barrientos-Salcedo, C., Cerda-García-Rojas, C. M., & Medina-Franco, J. L. (2025). Nat-UV DB: A Natural Products Database Underlying of Veracruz-Mexico. *F1000Research*, 14. <https://doi.org/10.12688/f1000research.161261.2>
- Llurba-Montesino, N., & Schmidt, T. J. (2018). Salvia species as sources of natural products with Antiprotozoal activity. *International Journal of Molecular Sciences*, 19(1). <https://doi.org/10.3390/ijms19010264>
- Lv, Q., Chen, G., He, H., Yang, Z., Zhao, L., Zhang, K., & Chen, C. Y.-C. (2023). TCMBank-the largest TCM database provides deep learning-based Chinese-Western medicine exclusion prediction. *Signal Transduction and Targeted Therapy*, 8(1), 127. <https://doi.org/10.1038/s41392-023-01339-1>
- Maitra, U., Stephen, C., & Ciesla, L. M. (2022). Drug discovery from natural products - Old problems and novel solutions for the treatment of neurodegenerative diseases. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 210, 114553. <https://doi.org/10.1016/j.jpba.2021.114553>
- Martínez Heredia, L., Quispe, P. A., Fernández, J. F., & Lavecchia, M. J. (2025). NaturAr: A Collaborative, Open-Source Database of Natural Products from Argentinian Biodiversity for Drug Discovery and Bioprospecting. *Journal of Chemical Information and Modeling*. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.4c01507>
- Martinez-Mayorga, K., Madariaga-Mazon, A., Medina-Franco, J. L., & Maggiora, G. (2020). The impact of chemoinformatics on drug discovery in the pharmaceutical industry. *Expert Opinion on Drug Discovery*, 15(3), 293-306. <https://doi.org/10.1016/10.1080/17460441.2020.1696307>
- Martinez-Mayorga, K., Marmolejo-Valencia, A. F., Cortes-Guzman, F., García-Ramos, J. C., Sánchez-Flores, E. I., Barroso-Flores, J.... & Esquivel-Rodriguez, B. (2017). Toxicity Assessment of Structurally Relevant Natural Products from Mexican Plants with Antinociceptive Activity. *Journal of the Mexican Chemical Society*, 61(3). <https://doi.org/10.1016/10.29356/jmcs.v61i3.344>
- Masic, I., & Ferhatovica, A. (2012). Review of most important biomedical databases for searching of biomedical scientific literature. *Donald School Journal of Ultrasound in Obstetrics and Gynecology*, 6(4), 343-361. <https://doi.org/10.5005/jp-journals-10009-1258>
- Menezes, R. P. B. de, Viana, J. de O., Muratov, E., Scotti, L., & Scotti, M. T. (2022). Computer-Assisted Discovery of Alkaloids with Schistosomicidal Activity. *Current Issues in Molecular Biology*, 44(1), 383-408. <https://doi.org/10.3390/cimb44010028>
- Mohanraj, K., Karthikeyan, B. S., Vivek-Ananth, R. P., Chand, R. P. B., Aparna, S. R., Mangalapandi, P., & Samal, A. (2018). IMPPAT: A curated database of Indian Medicinal Plants, Phytochemistry And Therapeutics. *Scientific Reports*, 8(1), 4329. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-22631-z>
- Mohan, S., Ajay Krishna, M. S., Chandramouli, M., Keri, R. S., Patil, S. A., Ningaiah, S., & Somappa, S. B. (2022). Antibacterial natural products from microbial and fungal sources: a decade of advances. *Molecular Diversity*. <https://doi.org/10.1007/s11030-022-10417-5>
- Newman, D. J., & Cragg, G. M. (2020). Natural products as sources of new drugs over the nearly four decades from 01/1981 to 09/2019. *Journal of Natural Products*, 83(3), 770-803. <https://doi.org/10.1021/acs.jnatprod.9b01285>
- Ntie-Kang, F., Zofou, D., Babiaka, S. B., Meudom, R., Scharfe, M., Lifongo, L. L.... & Efange, S. M. N. (2013). AfroDb: a select highly potent and diverse natural product library from African medicinal plants. *Plos One*, 8(10), e78085. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0078085>

- Pilon, A. C., Valli, M., Dametto, A. C., Pinto, M. E. F., Freire, R. T., Castro-Gamboa, I.... & Bolzani, V. S. (2017). NuBBEDB: an updated database to uncover chemical and biological information from Brazilian biodiversity. *Scientific Reports*, 7(1), 7215. <https://doi.org/10.1038/s41598-017-07451-x>
- Przybyłek, M. (2020). Application 2D Descriptors and Artificial Neural Networks for Beta-Glucosidase Inhibitors Screening. *Molecules*, 25(24). <https://doi.org/10.3390/molecules25245942>
- Raven, P. H., Gereau, R. E., Phillipson, P. B., Chatelain, C., Jenkins, C. N., & Ulloa Ulloa, C. (2020). The distribution of biodiversity richness in the tropics. *Science Advances*, 6(37). <https://doi.org/10.1126/sciadv.abc6228>
- Reich, M., & Labes, A. (2017). How to boost marine fungal research: A first step towards a multidisciplinary approach by combining molecular fungal ecology and natural products chemistry. *Marine Genomics*, 36, 57-75. <https://doi.org/10.1016/j.margen.2017.09.007>
- Rodrigues, G. C. S., Dos Santos Maia, M., de Menezes, R. P. B., Cavalcanti, A. B. S., de Sousa, N. F., de Moura, É. P.... & Scotti, M. T. (2020). Ligand and structure-based virtual screening of lamiaceae diterpenes with potential activity against a novel coronavirus (2019-nCoV). *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 20(24), 2126-2145. <https://doi.org/10.2174/1568026620666200716114546>
- Rodríguez-Pérez, J. R., Valencia-Sánchez, H. A., Mosquera-Martínez, O. M., Gómez-García, A., Medina-Franco, J. L., & Cortes-Hernández, H. F. (2025). NPDBEjeCol: A Natural Products Database from Colombia. *ACS Omega*. <https://doi.org/10.1021/acsomega.5c00936>
- Sabe, V. T., Ntombela, T., Jhamba, L. A., Maguire, G. E. M., Govender, T., Naicker, T., & Kruger, H. G. (2021). Current trends in computer aided drug design and a highlight of drugs discovered via computational techniques: A review. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 224, 113705. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2021.113705>
- Saldívar-González, F. I., & Medina-Franco, J. L. (2020). Chemoinformatics approaches to assess chemical diversity and complexity of small molecules. *Small molecule drug discovery* (pp. 83102). <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-818349-6.00003-0>
- Siddiqui, A. J., Jahan, S., Singh, R., Saxena, J., Ashraf, S. A., Khan, A.... & Adnan, M. (2022). Plants in anticancer drug discovery: from molecular mechanism to chemoprevention. *BioMed Research International*, 2022, 5425485. <https://doi.org/10.1155/2022/5425485>
- Sorokina, M., & Steinbeck, C. (2020). Review on natural products databases: where to find data in 2020. *Journal of Cheminformatics*, 12(1), 20. <https://doi.org/10.1186/s13321-020-00424-9>
- Tiwari, P., & Bae, H. (2022). Endophytic fungi: key insights, emerging prospects, and challenges in natural product drug discovery. *Microorganisms*, 10(2). <https://doi.org/10.3390/microorganisms10020360>
- UEFS (s. f.). Zinc. Consultado 20 de marzo de 2024. <http://zinc12.docking.org/catalogs/uefsnp>
- UNIIQUIM (Unidad de Informática del Instituto de Química). (s. f.). *Información sobre la biodiversidad química de los organismos del país*. Consultado 20 de marzo de 2024. <https://uniiquim.iquimica.unam.mx/>
- Vougogiannopoulou, K., Corona, A., Tramontano, E., Alexis, M. N., & Skaltsounis, A.-L. (2021). Natural and nature-derived products targeting human coronaviruses. *Molecules*, 26(2). <https://doi.org/10.3390/molecules26020448>
- Wainwright, C. L., Teixeira, M. M., Adelson, D. L., Buenz, E. J., David, B., Glaser, K. B.... & Wolfender, J.-L. (2022). Future directions for the discovery of natural product-derived immunomodulating drugs: an IUPHAR positional review. *Pharmacological Research*, 177, 106076. <https://doi.org/10.1016/j.phrs.2022.106076>
- Yang, J., Wang, D., Jia, C., Wang, M., Hao, G., & Yang, G. (2019). Freely accessible chemical database resources of compounds for in silico drug discovery. *Current Medicinal Chemistry*, 26(42), 7581-7597. <https://doi.org/10.2174/0929867325666180508100436>

- Yi, M., Lin, S., Zhang, B., Jin, H., & Ding, L. (2020). Antiviral potential of natural products from marine microbes. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 207, 112790. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2020.112790>
- Zani, C. L., & Carroll, A. R. (2017). Database for rapid dereplication of known natural products using data from MS and Fast NMR experiments. *Journal of Natural Products*, 80(6), 1758-1766. <https://doi.org/10.1021/acs.jnatprod.6b01093>
- Zhang, L., Song, J., Kong, L., Yuan, T., Li, W., Zhang, W.... & Du, G. (2020). The strategies and techniques of drug discovery from natural products. *Pharmacology & Therapeutics*, 216, 107686. <https://doi.org/10.1016/j.pharmthera.2020.107686>

NOTAS

[1] Se encuentra disponible de manera gratuita en el siguiente enlace <https://github.com/alexgoga21/LANaPDB-version-4>.

CC BY-NC-ND



Disponible en: <https://cienciaergosum.uaemex.mx/article/view/23187>

Cómo citar el artículo:

Gómez-García, A. y Medina-Franco, J. L. (2025). Bases de datos latinoamericanas de productos naturales como fuente de compuestos bioactivos. *CIENCIA ergo-sum*, 32. <https://doi.org/10.30878/ces.v32n0a32>

DOI: <https://doi.org/10.30878/ces.v32n0a32>



Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-SinDerivar4.0Internacional.

Declaración de autoría (CRediT):

Alejandro Gómez-García: conceptualización, análisis formal, investigación, metodología, redacción-borrador original y redacción-revisión y edición.

José Luis Medina-Franco: conceptualización, administración del proyecto, supervisión, redacción-borrador original y redacción-revisión y edición.