

## Mapeando Produtos Naturais via Mass Spectruym Query Language (MassQL): Um Estudo de Caso Com Lovastatina.

Anthony Rodrigues Moreira<sup>1,2</sup>, Natâna Santos Cunha<sup>1,3</sup>, Tainara Campos Vieira<sup>1,4</sup>, Sandro Duarte de Souza<sup>1,5</sup>, Paulo Wender P. Gomes<sup>1,2,3,5\*</sup>

1 Central Integrada em Metabolômica da Amazônia (CIMAZOM), Universidade Federal do Pará (UFPA), Belém-Pará.

2 Faculdade de Química, Instituto de Ciências Exatas e Naturais – UFPA, Belém-Pará. [rmoreira.ufpa@gmail.com](mailto:rmoreira.ufpa@gmail.com)

3 Programa de Pós-Graduação em Química, Instituto de Ciências Exatas e Naturais - UFPA, Belém-Pará. [natana.cunha@icen.ufpa.br](mailto:natana.cunha@icen.ufpa.br)

4 Faculdade de Farmácia, Instituto de Ciências da Saúde - UFPA, Belém-Pará. [tainara.vieira@ics.ufpa.br](mailto:tainara.vieira@ics.ufpa.br)

5 Programa de Pós-Graduação em Biodiversidade e Biotecnologia (BIONORTE) - UFPA, Belém-Pará. [sandro.duarte@unifesspa.edu.br](mailto:sandro.duarte@unifesspa.edu.br)

UFPA, Belém-Pará. \* [wendergomes@ufpa.br](mailto:wendergomes@ufpa.br)

**Palavras-chave:** Análogos; Caracterização; Classe química; Lovastatina; MassQL.

**Resumo:** A espectrometria de massas em tandem (MS/MS) é uma técnica amplamente utilizada para a caracterização de pequenas moléculas, fundamentada, em grande parte, na comparação de espectros MS/MS com bibliotecas espectrais obtidas experimentalmente. Entretanto, apesar dos avanços no desenvolvimento de bancos de dados, essa abordagem ainda é limitada pelo número restrito de bibliotecas disponíveis e pela quantidade (em crescimento) de compostos neles depositados. Com o propósito de aprimorar as buscas por moléculas conhecidas e impulsionar a descoberta de novos compostos, classes químicas e subclasses, o Mass Spectrum Query Language (MassQL)<sup>1</sup> foi lançado em 2021 como uma ferramenta inovadora e poderosa para mapear pequenas moléculas. Essa abordagem utiliza íons diagnósticos provenientes de metabólitos conhecidos para recuperar dados espectrais de metabólitos associados. Isto é, MassQL permite a busca dirigida de valores de  $m/z$  (MS/MS) previamente definidos em repositórios públicos ou privados em larga escala. Como prova de conceito, apresentamos aqui uma aplicação do MassQL para mapear lovastatina e seus análogos em repositórios públicos, por meio da análise de conjuntos de dados de extratos de *Aspergillus* (IDs: MSV000086604, MSV000081097, MSV00008990). Nossa análise confirmou a presença de metabólitos derivados de lovastatina, caracterizados por padrões específicos de fragmentação em dados. Esses resultados demonstram o potencial do MassQL para recuperar princípios ativos conhecidos e revelar novos análogos em potencial, contribuindo de forma significativa para a descoberta de moléculas bioativas.

<sup>1</sup> DAMIANI, Tito *et al.* Nature methods, 1247, 2025.

**Agradecimentos:** Os autores agradecem à Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação (PROPESP-UFPA) pela concessão de bolsa de Iniciação Científica a Anthony Rodrigues Moreira, através do Edital 05/2025 - PROPESP/PRODOUTOR.