

## Uso de desreplicação na identificação de compostos produzidos por linhagens fúngicas do ambiente marinho.

Karen de Jesus<sup>1\*</sup> (PG), Karin F. Bandeira<sup>1</sup> (PQ), Laura P. Ióca<sup>1</sup> (PG), Mario F. C. Santos<sup>1</sup> (PG), Everton L. F. Ferreira<sup>1</sup> (PG), Fabiana T. Rodrigues<sup>1</sup> (PQ), Messias S. Passos<sup>1</sup> (PG), Roberto G. S. Berlinck<sup>1</sup> (PQ).

<sup>1</sup>Universidade de São Paulo, Instituto de Química de São Carlos, \*karen@iqsc.usp.br.

Palavras Chave: *Fungo marinho, metabólitos secundários, desreplicação.*

### Introdução

A desreplicação de metabólitos secundários faz uso de técnicas cromatográficas hífenadas, como LC-UV-EM, para aquisição dos dados espectroscópicos analisados conjuntamente com informações de bancos de dados, como MarinLit e Dictionary of Natural Products (DNP), para uma rápida identificação de metabólitos já conhecidos.

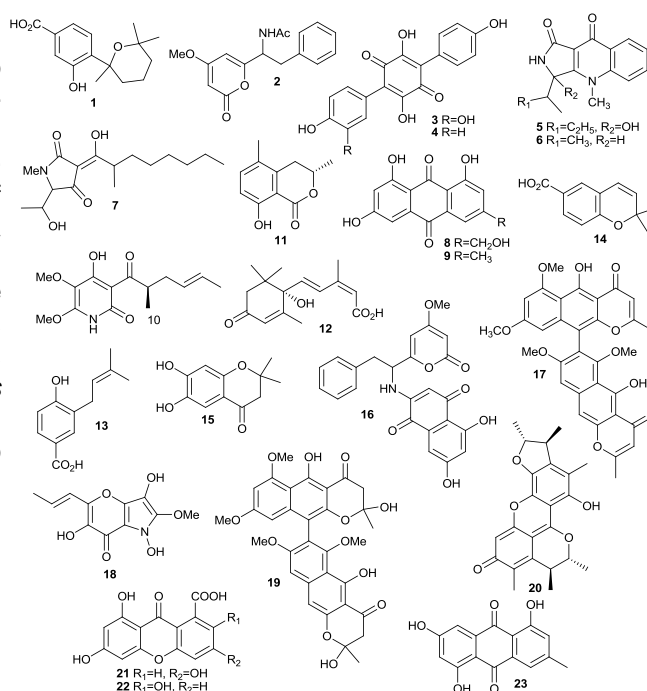
Neste trabalho, extratos brutos obtidos dos meios de cultura das linhagens fúngicas *Aspergillus* sp., *A. sydowii*, *Penicillium citrinum*, *P. glabrum*, *Acremonium zeae*, *Trichoderma* sp. e *Cochliobolus* sp. foram submetidos a fracionamentos cromatográficos, utilizando métodos de separação de acordo com a polaridade dos compostos presentes em cada extrato. Os compostos isolados foram identificados por HPLC-UV-MS e RMN-<sup>1</sup>H.

### Resultados e Discussão

O fracionamento cromatográfico dos extratos brutos dos meios de cultura levou ao isolamento de vinte e três compostos: o ácido sidowico (1), o pirofeno (2), a leucomelona (3), a atromentina (4), as quinolactacina C (5) e B (6), o penicillenol A (7), a citreoroseína (8), a emodina (9), a harzianopiridona (10), a 5-metilmelena (11), o (+)-ácido abscísico (12), o ácido 4-hidroxi-3,3(3'-metil-2'-butenil) benzóico (13), o ácido 2,2-dimetil-2H-1-cromeno-6-carboxílico (14), a 2,2-dimetil-6,7-dihidroxi-4-cromamona (15), a naftoquinonaimina (16), a aurasperona (17), a piranonigrina C (18), a aurasperona C (19), a penicitrinona A (20), o ácido 6,8-dihidroxi-3-metil-9-oxo-9H-xantona-1-carboxílico (21), a pinselina (22), a alantinona (23). O composto 15 é inédito na literatura.

A identificação dos compostos conhecidos foi realizada por desreplicação por LC-UV-EM e RMN-<sup>1</sup>H e utilização dos bancos de dados DNP, SciFinder e MarinLit.

A estrutura do composto 15 foi elucidada através de seus dados espectroscópicos (absorções no UV, ESI-EMAR e RMN-<sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C) comparados a estruturas semelhantes descritas na literatura<sup>1</sup>.



**Figura 1.** Compostos isolados a partir do extrato bruto obtido do meio de cultura de linhagens fúngicas derivadas do ambiente marinho.

### Conclusões

O uso de técnicas de desreplicação permitiu a rápida identificação de 23 compostos produzidos por diferentes linhagens fúngicas obtidas do ambiente marinho. Foram utilizadas apenas análises por LC-UV-EM e RMN-<sup>1</sup>H, e em poucos casos RMN-<sup>13</sup>C. Desta forma, evitou-se a utilização de longas horas de análise por RMN 2D para a identificação de substâncias conhecidas, minimizando-se a redundância, o desperdício de tempo, demonstrando-se a importância da desreplicação na análise de metabólitos fúngicos produzidos em meio de cultura.

### Agradecimentos

À FAPESP e CAPES, pelo suporte financeiro.

<sup>1</sup>Timár, T.; Jászberényi, J. C. *J. Heterocycl. Chem.*, **1988**, 25, 871.