

## Modificações estruturais em 1-(3,3-dimetil-2-oxiranil)-2,2-dimetil-3-butenil acetato (caleol) e atividade antimicrobiana dos derivados.

Euclésio Simionatto<sup>1</sup>(PQ), Ademir Farias Morel<sup>2</sup>(PQ), Ionara I. Dalcol<sup>2</sup>(PQ), Ubiratan F. da Silva<sup>2</sup>(PQ), Caroline Z. Stüker<sup>2</sup>(PQ), Carla Porto<sup>2</sup>(PG).

<sup>1</sup>Laboratório de Pesticidas Naturais-Departamento de Hidráulica e Transportes-UFMS-Campo Grande-MS

<sup>2</sup>Núcleo de Pesquisas de Produtos Naturais(NPPN)-Departamento de Química – UFSM – Santa Maria – RS.

E-mail – [eusimionatto@yahoo.com.br](mailto:eusimionatto@yahoo.com.br)

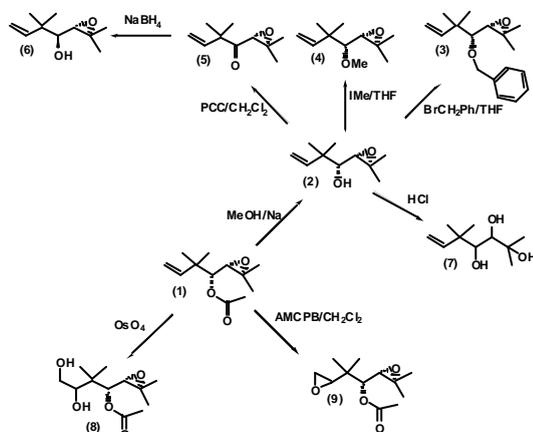
Palavras Chave: *caleol*, *estrutura* *atividade*, *Calea clematidea*.

### Introdução

O interesse pela espécie *Calea clematidea* se deve ao seu uso na medicina popular como antigrípal, estomático, e contra úlceras gástricas. Este arbusto encontrado no sul do Brasil foi primeiramente estudado em 2002, quando Flach<sup>1</sup> e colaboradores determinaram a composição do óleo volátil de folhas e flores. Nesta oportunidade, um novo epóxido natural denominado caleol (**1**) foi isolado e sua estrutura determinada. Além disso, as atividades antifúngicas do óleo e do composto isolado foram determinadas<sup>1</sup>. Devido às características estruturais da molécula, com três grupos funcionais e dois centros quirais, associadas à disponibilidade de obtenção da substância naturalmente (> 60% do óleo essencial), este trabalho teve como objetivo realizar transformações estruturais na molécula, com a finalidade de se avaliar um estudo estrutura-atividade biológica.

### Resultados e Discussão

Como resultado deste estudo, a molécula de caleol, foi submetida a várias condições reacionais, o que resultou nas estruturas (**2-9**), obtidas a partir de modificações estruturais em todas as funções da estrutura.



Os compostos foram caracterizados através de RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C e EM. Os centros quirais dos derivados contendo a função álcool secundário foram

determinados através de cromatografia gasosa quiral, através do método de Horeau<sup>2</sup>. Após a obtenção dos derivados e confirmação de suas estruturas, os mesmos foram submetidos a uma série de testes antimicrobianos, com a finalidade de estudar uma relação estrutura – atividade frente a bactérias. O método aplicado foi a determinação da quantidade de quantidade substancia ativa (µg) por bioautografia. Utilizaram-se como microorganismos indicadores as bactérias *S. aureos*, *S. epidermidis*, *K. pneumoneae*, *E. coli*, *S. setubal*, *P. aeruginosa* e *B. subtilis*. Através deste método se identificou o principal derivado bioativo, comparado ao produto natural.

### Conclusões

De acordo com os resultados obtidos, pode-se observar que as variações na molécula natural 1-(3,3-dimetil-2-oxiranil)-2,2-dimetil-3-butenil acetato (caleol), obtida do óleo essencial de *Calea clematidea*, provocaram alterações na atividade antibacteriana. O derivado que mostrou maior atividade, contra a maioria dos microorganismos testados foi o diepóxido (**9**), resultante da epoxidação da ligação dupla, demonstrando que a função epóxido é importante na atividade da molécula. Cabe ressaltar o efeito deste derivado contra as bactérias *S. aureos* e *P. aeruginosa*, onde a quantidade de substancia necessária para a inibição foi de 3,125 µg.

### Agradecimentos

Fundect-MS, Capes.

Referencias:

<sup>1</sup> Flach A, Simionatto E, Silva UF, Zanatta N, Morel AF, Linares CE. *Planta Medica* **2002**, 68, 836-2.

<sup>2</sup> König, W.A., Ghercke, B. E., Weseloh, G., *Chirality* **1994**, 6, 141-146.