

## Elucidação estrutural, defesa química e avaliação biológica do esterol hemicetal isolado do coral invasor *Chromonephthea braziliensis*.

Beatriz G. Fleury<sup>1\*</sup> (PQ), Bruno G. Lages<sup>1</sup> (PG), Jussara P. Barbosa<sup>2</sup> (PQ), Gisela L. da Costa<sup>2</sup> (PQ), Carlos R. Kaiser<sup>3</sup> (PQ), Ângelo C. Pinto<sup>3</sup> (PQ). \*[bqgfleury@uol.com.br](mailto:bqgfleury@uol.com.br)

<sup>1</sup>Depto. Ecologia, IBRAG, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rua São Francisco Xavier, 524, PHLC, sala 220, Rio de Janeiro, RJ, 20.559-900; <sup>2</sup>Laboratório de Taxonomia, Bioquímica e Bioprospecção de Fungos, Instituto Oswaldo Cruz/FIOCRUZ, RJ; <sup>3</sup>Laboratório de Produtos naturais, Instituto de Química, Depto. Química Orgânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ.

Palavras Chave: *Chromonephthea braziliensis*, esterol, defesa química, atividade antibacteriana

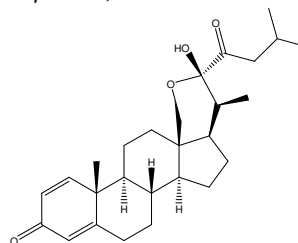
### Introdução

Espécies exóticas constituem ameaça iminente à integridade de comunidades naturais e perda da biodiversidade (Fleury *et al.*, 2005; Lages *et al.*, 2005)<sup>1,2</sup>. Este trabalho relata o isolamento e a identificação de novo esterol hemicetal obtido do coral invasor *C. braziliensis* (Nephtheidae, Alcyonacea), a avaliação *in situ* desta substância como defesa antipredação por peixes generalistas, e a avaliação do potencial antibacteriano.

### Resultados e Discussão

Colônias do coral *C. braziliensis* foram coletadas em Arraial do Cabo, RJ, liofilizadas e extraídas exaustivamente com n-hexano, com o auxílio de ultra-som. O extrato bruto obtido foi submetido ao fracionamento em coluna cromatográfica (sílica gel 60) eluída com n-hexano e acetato de etila, em diferentes polaridades. A fração majoritária foi purificada através da cromatografia em coluna flash (sílica gel 60) seguida da recristalização em metanol, fornecendo um sólido incolor. A estrutura química da substância apresentou fórmula molecular C<sub>27</sub>H<sub>38</sub>O<sub>4</sub>, determinada por EM-IES. A absorção em 242 nm, no espectro de UV, indicou a presença de uma ciclohexadienona conjugada. Esta observação foi confirmada pela presença de uma banda de absorção forte em 1660 cm<sup>-1</sup> no espectro de IV, e dos sinais δ186.4 (C-3), 123,9 (C-4) e 6,09 (H-4, d, J=1,7 Hz), 127,6 (C-2) e 6,26 (H-2, dd, J=10,2 e 1,7 Hz), 155,7 (C-1) e 7,09 (H-1, d, J=10,2 Hz), nos espectros de RMN. O espectro de massas apresentou como pico base o íon m/z 341 (M<sup>+</sup>-85), correspondente ao fragmento <sup>+</sup>O=C-CH<sub>2</sub>-isopropila. A partir da análise dos espectros de RMN 1D e 2D pôde-se confirmar o esqueleto típico de esterol colest-1,4-dien-3-ona. O sinal atípico do carbono quaternário C-22 em δ 98,8, devido à presença de dois átomos de oxigênio ligados a ele, sugeriu a presença de um hemicetal. Este fato, associado às demais correlações dos sinais no espectro de HMBC, sugerem a presença de um novo anel com ponte de éter. A estereoquímica relativa foi estabelecida através das correlações dos sinais observados no espectro NOESY. Estes assinalamentos nos permitiram concluir que a estrutura proposta representa um novo esterol marinho denominado 23-cladielina-A.

31ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química



**Figura 1:** 23-ceto-cladielina-A

A ação defensiva de 23-ceto-cladielina-A foi avaliada *in situ* frente a peixes generalistas, através do método desenvolvido por Fenical e Pawlik<sup>3</sup>. A atividade antibacteriana deste esterol foi avaliada através de ensaios biológicos para a determinação da concentração mínima inibitória (CMI)<sup>4</sup> frente a bactérias Gram positivas e negativas (Tabela 1).

**Tabela 1:** Concentração mínima inibitória (µg/mL) de 23-ceto-cladielina-A

|         | Kp   | Sa  | Ec   | Pa   |
|---------|------|-----|------|------|
| Esterol | 1000 | 500 | 1000 | 1000 |

\*Kp: *Klebsiella pneumoniae*, Sa: *Staphylococcus aureus*; Ec: *Escherichia coli*; Pa: *Pseudomonas aeruginosa*. Antibiótico: Cloranfenicol (10 µg/mL)

### Conclusões

O novo esterol hemicetal, 23-ceto-cladielina-A, foi isolado do coral invasor *C. braziliensis*. A substância apresentou fraca atividade antibacteriana frente aos microrganismos testados. Por outro lado, os bioensaios de campo comprovaram o uso deste esterol, como defesa química por esta espécie exótica, como um fator eficaz para o sucesso de invasão em novas áreas.

### Agradecimentos

À FAPERJ e CNPq pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup>Fleury, B.G.; Lages, B.G.; Ferreira, C.E.L. e Pereira, R.C. *Ciência Hoje* **2005**, 36, 212.

<sup>2</sup>Lages, B.G.; Fleury, B.G.; Ferreira, C.E.L. e Pereira, R.C. *J. Exp. Mar. Biol. Ecol.* **2005**, 328, 127.

<sup>3</sup>Fenical, W. e Pawlik, J.R. *Mar. Ecol. Prog. Ser.* **1991**, 75, 1.

<sup>4</sup>NCCLS, documento M7-A6, 6ª Edição, USA, **2003**.