

## Qual a estrutura da aminocumarina isolada da esponja *Aiolochoiria crassa*?

Juliana Bergamasco\* (PG)<sup>1</sup>, Roberto G. S. Berlinck (PQ)<sup>1</sup>, Simone P. Lira (PQ)<sup>2</sup>, Eduardo Hajdu (PQ)<sup>3</sup>

Email: juzita@iqsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, SP, Brasil; <sup>2</sup>Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz, Piracicaba, SP, Brasil; <sup>3</sup>Museu Nacional, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Palavras Chave: antibiotico, esponja marinha, citotóxico, *Aiolochoiria crassa*, bromotirosina.

### Introdução

Esponjas marinhas da ordem Verongida são consideradas a maior fonte natural de metabólitos bromados, biogeneticamente derivados da bromotirosina. Metabólitos secundários contendo até quatro resíduos bromotirosina foram isolados de esponjas pertencentes à ordem Verongida. O interesse nesses compostos bromados se deve à suas atividades biológicas, tanto *in vitro* quanto *in vivo*. Apesar da extensiva investigação química destas espécies de esponjas, ainda existem incertezas na identificação taxonômica destes animais. A espécie *Aiolochoiria crassa* já foi citada como *Ianthella ianthella*, *Ianthella ardis* e *Pseudoceratina crassa*, devido a variabilidade fenotípica e ausência de características estruturais confiáveis. Sendo assim, o objetivo principal do presente projeto foi de realizar a investigação química de diferentes espécimens de *A. crassa*, de maneira a verificar a ocorrência de padrões químicos que auxiliem a classificação desta espécie de esponja.

### Resultados e Discussão

Foram realizados processos de fracionamento cromatográfico com extratos de 5 diferentes exemplares de *A. crassa*. Entre diversas frações obtidas do exemplar codificado BA07ES-87, observou-se a presença de um composto não derivado da bromotirosina. Após o isolamento deste, a análise de seus dados espectroscópicos não permitiu determinar sua estrutura de maneira inequívoca. Constatou-se que se trata de uma aminocumarina de massa molecular 193 Da, com 4 estruturas isoméricas possíveis. Cabe ressaltar que a presença de um átomo de nitrogênio foi confirmada pela análise por espectrometria de massas ( $[M+H]^+$  em  $m/z$  174). Este é o primeiro exemplo de um derivado de aminocumarina isolado de um organismo marinho. Embora a estrutura do composto não pôde ser estabelecida de maneira inequívoca, serão discutidas as hipóteses estruturais apresentadas, com base na interpretação dos espectros de RMN mono- e bidimensionais.

32ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Tabela 1. Correlações C–H no espectro HSQC da fração Ac87\*-ace5b2

$\delta$ C (ppm)	$\delta$ H (ppm)	HMBC
173,2	–	7,6; 6,3
151,6	–	6,8; 6,3
139,3	–	7,6
137,1	–	7,6; 6,8; 6,3
128,7	–	7,6; 6,8; 6,3
123,7	7,6 (d, 5 Hz)	–
114,2	6,8 (d, 8 Hz)	–
112,7	–	7,6; 6,3
103,8	6,3 (d, 8,3 Hz)	–

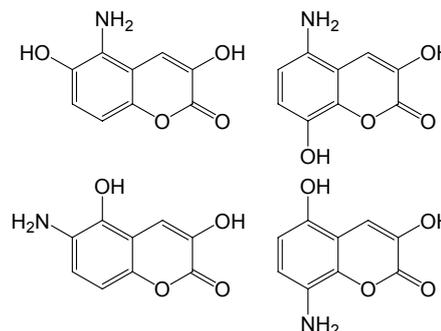


Figura 1. Quatro possíveis estruturas isoméricas para a aminocumarina presente na fração Ac87\*-ace5b2.

### Conclusões

O presente trabalho ilustra que nem sempre uma interpretação cuidadosa de dados espectroscópicos permite o estabelecimento da estrutura de um produto natural de maneira inequívoca. Assim, será necessária a realização da síntese total de pelo menos 2 dos quatro isômeros propostos acima para provar a estrutura do composto isolado de *A. crassa*, possivelmente de origem microbiana.

### Agradecimentos

Ao prof. Antonio C. B. Burtoloso, por discussões frutíferas na etapa de determinação estrutural, bem como à FAPESP, CNPq e IQSC-USP pelo apoio financeiro.