



Novos alilditiocarbimatos de amônio e fosfônio derivados de 4-clorobenzaldeído e butilsulfonilditiocarbimato de potássio e sua atividade antifúngica frente ao fungo *Hemileia vastatrix*
Universidade Federal de Viçosa – MG

Maria Fernanda Vieira Dias, DEQ/UFV (maria.f.fernanda@ufv.br); Mayura Marques Magalhães Rubinger, DEQ/UFV (mayura@ufv.br); Nathália Matias Albuini Oliveira, DEQ/UFV (nathalia.albuini@hotmail.com); Iare Soares Ribeiro, DEQ/UFV (iare.ribeiro@ufv.br); Laércio Zambolim (zambolim@ufv.br)

Palavras-chave: aduto de Morita-Baylis-Hillman; alilditiocarbimatos; *Hemileia vastatrix*

Área temática: Síntese Orgânica

Grande Área: Ciências Exatas e Tecnológicas

Categoria do trabalho: Pesquisa

Introdução

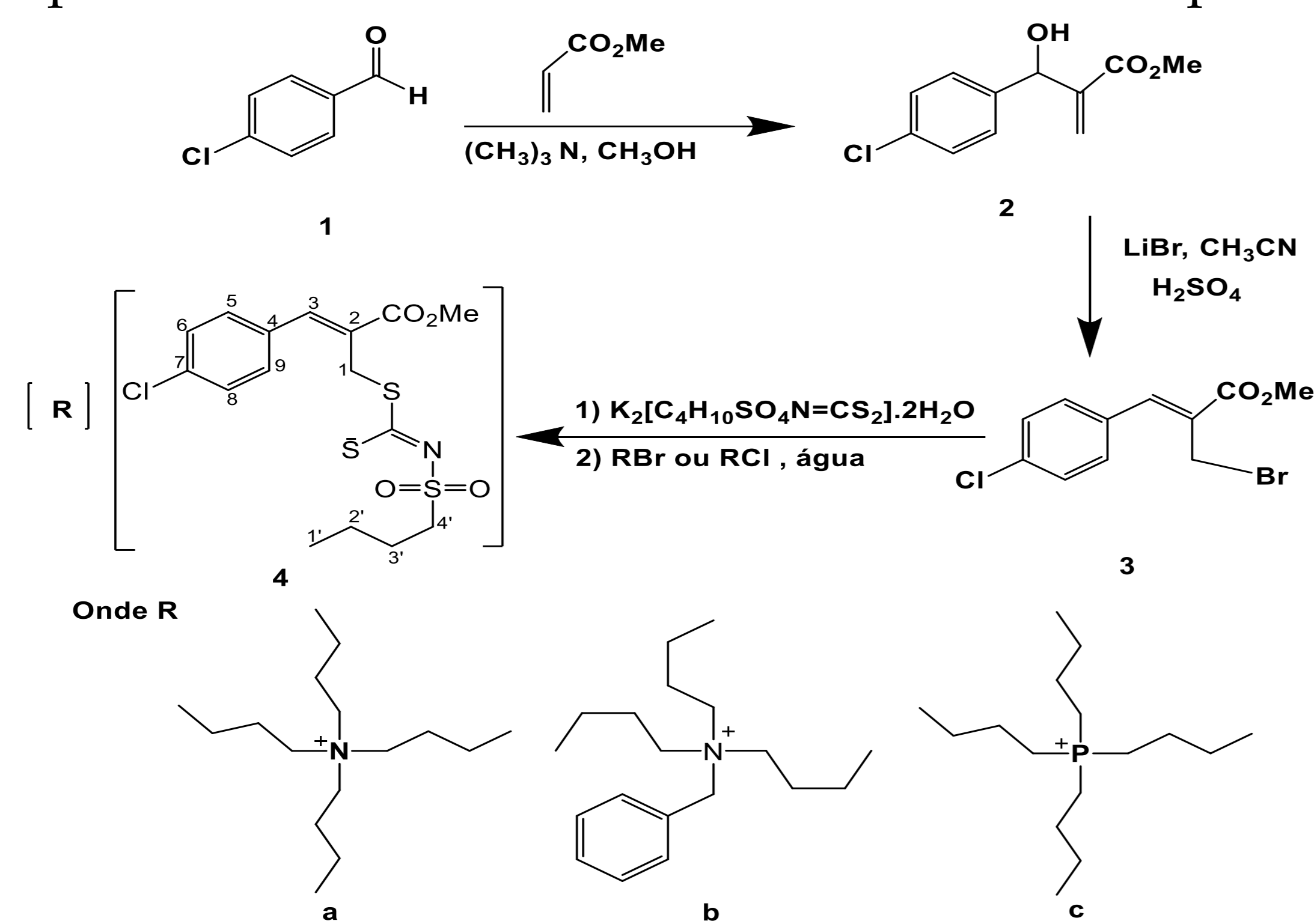
A reação de Morita-Baylis-Hillman (MBH) é uma estratégia sintética amplamente empregada para preparação de compostos com potencial atividade biológica¹. Sais de ditiocarbimatos preparados a partir de adutos de MBH se mostraram promissores no controle de algumas espécies de fungos *in vitro*². *Hemileia vastatrix* é o agente causador da doença conhecida como ferrugem do café, que tem gerado perdas significativas em lavouras na América Latina. O aprofundamento de estudos dos ditiocarbimatos tem o potencial de gerar novos princípios ativos eficazes no controle de doenças de plantas.

Objetivos

Sintetizar e caracterizar três novos sais de alilditiocarbimatos e avaliar sua atividade *in vitro* frente ao fungo *H. vastatrix*.

Material e Métodos

Os compostos foram sintetizados de acordo com o esquema 1:



Esquema 1. Rota sintética

Para avaliação da atividade antifúngica, as novas substâncias foram incorporadas em ágar-ágar e esporos de *H. vastatrix* foram depositados em sua superfície. Após 24 h foram contados os esporos germinados na placa controle e nos tratamentos e a porcentagem de inibição foi calculada².

Resultados e Discussão

A tabela 1 reúne as principais bandas observadas nos espectros no infravermelho dos novos sais de alilditiocarbimato.

Apoio Financeiro

CNPq, CAPES, FAPEMIG

Tabela 1. Principais bandas de estiramento observadas nos espectros no IV dos sais de alilditiocarbimato sintetizados.

Composto	C=O	C=N	SO _{2(as)}	SO _{2(s)}	CS ₂	C-Cl
4a	1709	1381	1259	1119	935	783
4b	1709	1379	1257	1117	935	781
4c	1711	1381	1259	1119	935	781

A presença das bandas no IV representativas tanto da porção do ditiocarbimato quanto da porção do brometo alílico confirmam a junção destes compostos formando o alilditiocarbimato. As integrais dos sinais nos espectros de RMN de ¹H confirmam a quantidade esperada de átomos de hidrogênio, bem como a proporção 1:1 entre cátion e ânion. Destacam-se dois simpletos em δ 3,68 e 4,09, atribuídos aos três hidrogênios do grupo metoxila e aos dois hidrogênios H1, respectivamente. Os hidrogênios aromáticos da porção aniônica foram observados na forma de dois dupletos com $J = 8$ Hz em 7,26 (H6, H8) e 7,44 (H5, H9). Os sinais dos espectros de RMN de ¹³C também estão de acordo com a quantidade esperada de carbonos quimicamente diferentes em cada substância. Os sinais em δ 33,3 e 52,1 foram atribuídos ao carbono C1 e ao carbono do grupo metoxila, respectivamente. O sinal referente ao carbono da carbonila do éster foi observado em δ 168 e, o do carbono do grupo C=N, em δ 200. Os novos sais 4a, 4b e 4c inibiram a germinação de esporos de *H. vastatrix*, respectivamente, em 48, 37 e 29% a 0,05 mmol.L⁻¹ e 51, 44 e 44 % a 0,1 mmol.L⁻¹. Dentre as substâncias testadas, o composto 4a apresentou o melhor resultado e foi escolhido como protótipo para a continuidade desses estudos.

Conclusões

Foram sintetizadas três sais alilditiocarbimatos inéditos e suas estruturas foram confirmadas através de espectroscopias no IV e de RMN de ¹³C e ¹H. Esses compostos inibiram a germinação de esporos de *H. vastatrix*, tendo o composto 4a o melhor resultado.

Bibliografia

- LIMA JUNIOR, C.G. *et al.* Bio Org Chem, v. 6, n. 38, p. 279-284, 2010.
- VIDIGAL, A.E.C. *et al.* J. Braz. Chem. Soc., v. 31, n. 4, p. 703-715, 2020

Agradecimentos

DEQ/UFV