

Análise conformacional de novos piretróides sintéticos da classe dos éteres de oxima com potencial atividade inseticida.

Rodney Santos* (PG), Carlos Mauricio R. Sant'Anna (PQ), Marco Edilson F. de Lima (PQ)

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro - Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Química
 rodneysantos@ufrj.br; marco@ufrj.br

Palavras Chave: piretróides, inseticidas, éteres de oxima

Introdução

Com a evolução das pesquisas ao longo dos anos, a presença dos centros assimétricos, outrora associados à atividade inseticida (AI) em piretróides sintéticos e naturais, passou a ser uma característica secundária, haja vista que hoje muitos piretróides sintéticos sem centros assimétricos possuem notável AI¹. Bull *et al.* relataram a síntese e avaliação da AI de novos piretróides não ésteres **1** e **2**, que possuem como principal função um éter de oxima (**Figura 1**)². Embora não se conheça o exato local da ação dos piretróides, eles estão intimamente ligados a um receptor quiral ou a uma conformação definida, o que nos levou a avaliar com um modelo teórico o perfil conformacional de novos análogos cíclicos dos piretróides descritos por Bull, sintetizados por nosso grupo de pesquisa (**3-8**, **Figura 1**), para que se possa avaliar o potencial destes análogos como compostos com ação inseticida.

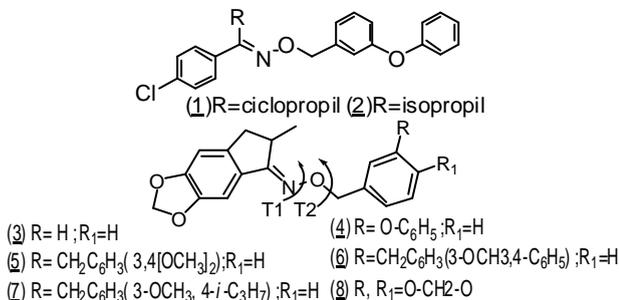


Figura 1. Piretróides do tipo éteres de oxima².

Resultados e Discussão

Dos piretróides sintetizados por Bull *et al.* escolheu-se as estruturas **1** e **2**, com alta AI, que apresentaram atividade somente para os diastereoisômeros *E*.² Os ângulos diedros T1 e T2 foram escolhidos em função da menor restrição conformacional observada para estas ligações. O programa utilizado para a construção das estruturas foi o PC Spartan-Plus (Wavefunction, Inc.) e as otimizações estruturais, utilizando o método PM3, foram feitas com o programa MOPAC2002 (Fujitsu Limited). Todos os dados foram interpretados em gráficos de superfície, representado o ΔH_f em função dos ângulos T1 e T2, como exemplificado nos gráficos das estruturas **1** e **4**, representados na **Figura 3**.

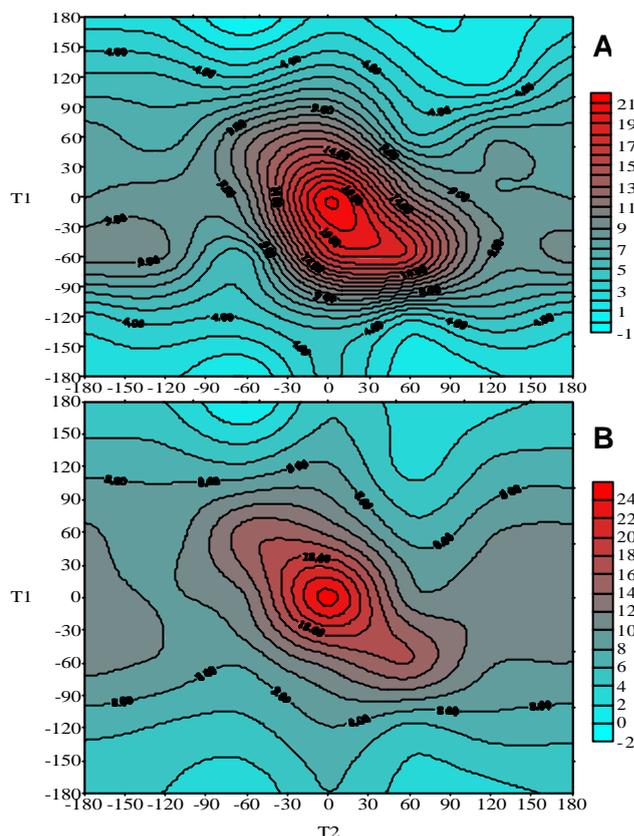


Figura 3. Superfície de energia potencial: estruturas **1** (A) e **4** (B).

Os compostos **1**, com alta AI, e **4**, sintetizado por nosso grupo, apresentam perfis conformacionais semelhantes, inclusive nos valores relativos da variação de ΔH_f (em kcal/mol).

Conclusões

Os compostos sintetizados apresentam um perfil conformacional próximo ao de estruturas com AI comprovada. Embora outros fatores possam influenciar a AI dos compostos, estes resultados indicam que eles podem alcançar a mesma conformação bioativa dos piretróides ativos. Os novos derivados obtidos encontram-se em fase de avaliação sobre insetos de interesse veterinário e larvas de *Aedes aegypti*.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERJ

¹ Elliot, M.E.; Farnham, A.W.; Janes, N.F.; Khambay, B.P.S. *Pestic. Sci.* **1988**, 23, 215.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

² Bull, M.J.; Davies, J.H.; Searle, R.J.G.; Henry, A.C. *Pestic. Sci.*
1980, 11, 249.