

# Caracterização por Cromatografia Gasosa e Espectrometria de Massas de Bis- $\gamma$ -lactonas com Atividade Fungicida

Leandro de C Alves<sup>1\*</sup> (IC) (lcalves22@yahoo.com.br), Mayura Marques M Rubinger<sup>1</sup> (PQ), Gulab Newandram Jham<sup>1</sup> (PQ), Pedro de Azevedo Castelo-Branco<sup>2</sup> (PQ), Dorila Pilo-Veloso<sup>3</sup> (PQ).

<sup>1</sup>Departamento de Química-CCE, UFV, Viçosa, MG. <sup>2</sup>Setor de Química-CEFET-Campos, Campos de Goytacases, RJ.

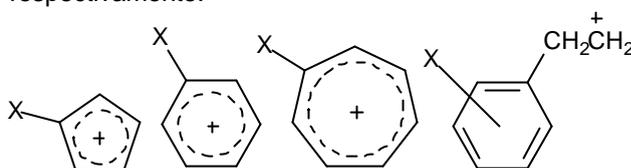
<sup>3</sup>Departamento de Química, ICEX, UFMG, Belo Horizonte, MG

Palavras Chave: bis- $\gamma$ -lactonas, CG/EM, avenaciólídeo

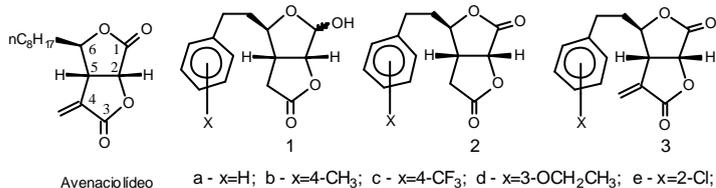
## Introdução

O avenaciólídeo (**Figura 1**) é um fungicida natural presente em extratos de *Aspergillus avenaceus*.<sup>1</sup> As bis- $\gamma$ -lactonas sintéticas análogas (3) (**Figura 1**) são ativas contra fungos dos gêneros *Colletotrichum* e *Fusarium*, enquanto seus precursores (1) e (2) não apresentaram atividade.<sup>2</sup> Os compostos (1-3) foram preparados a partir da diacetona-D-glicose, conforme rota sintética adaptada da literatura<sup>2,3</sup>. Este trabalho apresenta um estudo por CG/EM (impacto de elétrons) dessas substâncias. Foram determinados os índices de retenção de Kováts e padrões de fragmentação para a identificação do esqueleto bicíclico e das cadeias laterais ligadas ao C-6.

espectros das bis- $\gamma$ -lactonas (2) e (3) apresentam os valores de  $m/z$  141 e 155, e 153 e 167, respectivamente. Outros fragmentos importantes para distinguir as bis- $\gamma$ -lactonas (2) dos análogos finais (3) são aqueles que originam os picos em  $m/z$  85 e 97, respectivamente.



**Figura 2.** Fragmentos característicos dos grupos substituintes cujos picos foram observados nos espectros dos compostos (1-3).



**Figura 1** – O avenaciólídeo e os compostos análogos em estudo.

## Resultados e Discussão

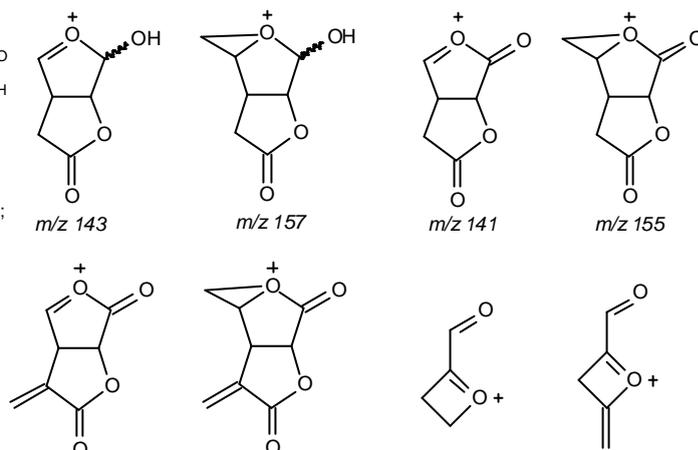
Amostras de 1  $\mu$ L de soluções 1 mg/mL em  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  dos compostos (1-3) contendo hidrocarbonetos saturados, foram injetadas em cromatógrafo gasoso com coluna com fase estacionária DB-1 e os índices de Kováts determinados estão relacionados na **Tabela 1**.

**Tabela 1.** Índices de Kováts obtidos para (1-3).

	a	b	c	d	e	f	g	h	i
<b>1</b>	2145	2240	2175	2464	2317	2362	2385	2165	2464
<b>2</b>	2207	2300	2248	2527	2379	2435	2456	2230	2540
<b>3</b>	2231	2330	2257	2553	2395	2451	2472	2244	1824

Todos espectros apresentaram os picos dos íons moleculares e podem ser facilmente diferenciados pela presença de sinais característicos dos grupos substituintes ligados ao C-6, conforme exemplificado na **Figura 2**.

Os álcoois 1 podem ser diferenciados das bis-lactonas por diversos picos devidos a fragmentos comuns ao esqueleto bicíclico, como os de  $m/z$  143 e 157 (**Figura 3**). Os picos correspondentes nos 29<sup>ª</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química



**Figura 3.** Fragmentos característicos dos esqueletos bicíclicos dos compostos (1-3).

## Conclusões

Foram caracterizados através de índices de Kováts e do padrão de fragmentação por espectrometria de massas 27 compostos bicíclicos, sendo que 9 deles apresentam atividade fungicida e são análogos ao produto natural avenaciólídeo.

## Agradecimentos

À FAPEMIG e CNPq por apoio financeiro e bolsas.

<sup>1</sup> Brookes, D.; Sternhell, B.K.; Tidd, K. e Turner, W. B. *J. Chem. Soc.* **1963**, 68, 5385.

<sup>2</sup> Castelo-Branco, P. A.; Rubinger, M.M.M.; Alves, L. C. e Pilo-Veloso, D. 28<sup>ª</sup> RASBQ. **2005**, QO-177.

<sup>3</sup> Anderson, R.C. e Fraser-Reid, B. *J. Org. Chem.* **1985**, 50, 4781.