# Análise Quimiométrica de Derivados de Azóis Frente à *Moliniophthora perniciosa*

**Sabrina G. R. Mota[1] (PG)*, Tânia F. Barros[2] (PQ). Marcelo S. Castilho[1] (PQ) *E-mail: *sabrina_gondim@yahoo.com.br***

*[1] LaBiMM, Faculdade de Farmácia, UFBA, Salvador-BA, Brasil, [2] Laboratório de Pesquisa em Microbiologia Clínica, Faculdade de Farmácia, UFBA, Salvador-BA, Brasil*

Palavras Chave: *Moliniphthora perniciosa, azóis, análise quimiométrica*

## Introdução

O fitopatógeno causador da vassoura-de-bruxa, *Moliniophthora perniciosa*, têm causado grandes prejuízos à produção de cacau, principalmente no estado da Bahia, a maior região produtora de cacau do continente Americano[1,2,3]. Diante do grande impacto econômico e social decorrente dessa doença, vários programas de controle foram desenvolvidos, contudo eles apresentam baixa eficiência[4].

Terbuconazol é ativo contra *M. perniciosa* tanto *in vitro* quanto *in locu*[4], contudo não existe um estudo sistemático sobre a atividade de derivados de azóis ou triazóis frente a *M. perniciosa*. Visando caracterizar a atividade de derivados imidazólicos e triazólicos, frente a *M. perniciosa*, bem como, criar modelos classificatórios que descrevam sua atividade fungicida, uma série de 17 derivados imidazólicos e triazólicos foi avaliada em ensaios de concentração única (1,2 $\mu$M) conforme o protocolo CLSI. Os resultados obtidos foram utilizados na análise quimiométrica descrita nesse trabalho.

## Resultados e Discussão

Entre os 17 compostos testados, 10 apresentaram atividade fungicida contra *M. perniciosa*, enquanto os demais (7) foram inativos (Figura 1).

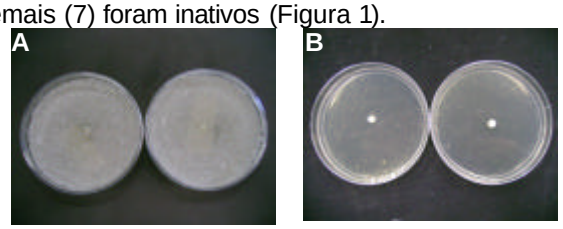


**Figura 1.** Teste atividade fungicida por difusão em disco. A – Etaconazol, B- Metconazol

Estes dados sugerem que diferenças na estrutura química desses compostos influenciam sua atividade fungicida frente a *M. perniciosa*. Visando desenvolver modelos classificatórios robustos e com alto poder preditivo, o conjunto inicial foi dividido em Treino (7 ativos e 6 inativos) e Teste (3 ativos e 1 inativo). As variáveis independentes 2D, calculadas com o programa DRAGON 5.6 e selecionadas através de peso de Fisher (25 descritores), foram centradas na média e utilizadas em análises exploratórias através de PCA e HCA (distâncias euclideanas utilizando método complete), disponível no programa PIROUETTE 3.11. Nenhum desses métodos foi capaz de agrupar os compostos ativos e inativos em famílias distintas ou separá-los no espaço químico. Por outro lado, o método supervisionado SIMCA foi capaz de classificar corretamente 100% dos compostos ativos e inativos, utilizando 3 componentes principais (Figura 2).

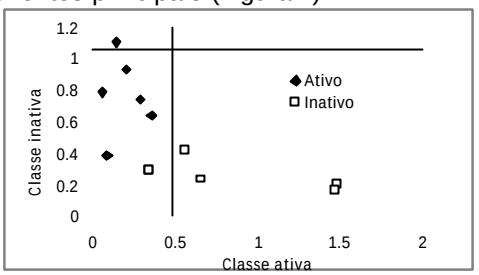


**Figura 2.** Distância inter-classe dos compostos ativos e inativos segundo SIMCA.

A fim de avaliar o poder preditivo do modelo, ele foi utilizado para classificar os compostos do conjunto Teste, não utilizados durante o desenvolvimento do modelo (Tabela 1).

**Tabela 1.** Atividade predita versus experimental para o conjunto Teste

| Composto | Atividade experimental | Atividade predita |
|---|---|---|
| Cyproconazol | Ativo | Ativo |
| Diniconazol | Ativo | Ativo |
| Hexaconazol | Ativo | Ativo |
| Fluquiconazol | Inativo | Inativo |

## Conclusões

O melhor modelo classificatório diferencia claramente compostos ativos dos inativos, contudo à distância interclasses ainda é pequena (0,96). Portanto é necessário ampliar o número de compostos testados a fim de garantir maior poder preditivo ao modelo.

## Agradecimentos

FAPESB, FINEP, CNPq

[1] Purdy, L. H.; Schmidt, R. A., 1996. Annu. *Rev. Phytopathol.* 34: 573-594.

[2] Alves, S. A. M., 2002. Dissertação de mestrado Escola Superior de Agricultura;

[3] Pereira G. A. G.; Scarpari, L. M.; Meinhardt, L. M.; Mazzafera, P.; Pomella, A. W. V.; Schiavinato, M. A.; Cascardo, J. C. M., 2005, *Journal of Experimental Botany*. 56 (413): 865–877;

[4] Oliveira, M. L.; Luz, E. D. M. N., 2005. CEPLAC/ CEPEC/SEFIT, p. 132, Ilhéus.