

Análise quimiométrica da atividade fungicida de derivados de azol frente à *Moniliophthora perniciosa*

Sabrina G. R. Mota¹ (PG), Tânia F. Barros² (PQ), Marcelo S. Castilho¹ (PQ)*, *E-mail: castilho@ufba.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: *Moniliophthora perniciosa*, azóis, análise quimiométrica

Introdução

O fitopatógeno causador da vassoura-de-bruxa, *Moniliophthora perniciosa*, têm causado grandes prejuízos à produção de cacau, principalmente no estado da Bahia, a maior região produtora de cacau do continente Americano.¹ Diante do grande impacto econômico e social decorrente dessa doença, vários programas de controle foram desenvolvidos, contudo eles apresentam baixa eficiência.² Uma alternativa para o combate de *M. perniciosa* é a utilização de fungicidas sistêmicos. Terbuconazol, Hexaconazol e Triadiminol são ativos tanto *in vitro* quanto *in locu*,² contudo não existe um estudo sistemático sobre a atividade de derivados de azol frente a este fitopatógeno. Visando caracterizar a atividade de derivados imidazólicos e triazólicos, frente a *M. perniciosa*, um ensaio de susceptibilidade foi padronizado.³ A partir dos resultados obtidos, métodos quimiométricos foram utilizados para criar modelos classificatórios que auxiliam no entendimento das características físico-químicas e estruturais que determinam a atividade fungicida desses compostos.

Resultados e Discussão

Um conjunto de 33 derivados de azol foi dividido em Treino (11 ativos e 13 inativos) e Teste (4 ativos e 5 inativo) para fins de validação externa. A seguir, descritores 2D, calculados com o programa DRAGON 5.6 e selecionados através de peso de Fisher (28 descritores), foram centrados na média e utilizados para análise de componentes principais (PCA) – **Figura 1**.

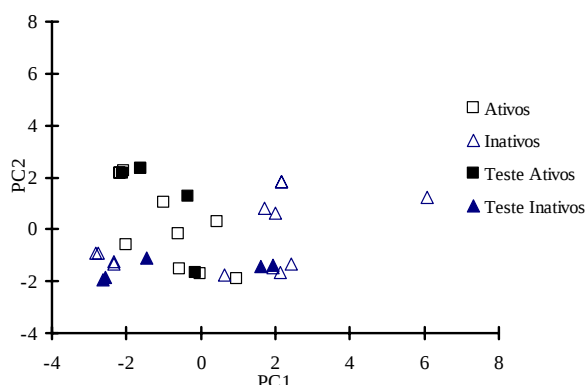


Figura 1. Análise das Componentes Principais dos compostos ativos e inativos para o conjunto, utilizando 4 PCs.

Segundo a PCA, os compostos ativos estão concentrados entre os valores -2,1 e 1,0 de PC1, enquanto que a maioria dos compostos inativos (92,3 %) tem valores de PC1 fora desse intervalo. Adicionalmente, O modelo de PCA consegue classificar corretamente 88 % dos compostos do conjunto Teste. A utilização do método SIMCA obteve resultados ainda melhores, pois foi capaz de classificar corretamente 100% dos compostos dos conjuntos Treino e Teste, utilizando 3 componentes principais (Figura 2).

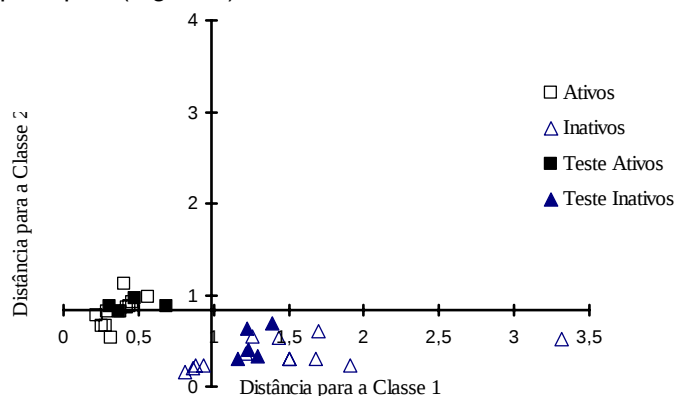


Figura 2. Distância interclasse (2,38) dos compostos ativos e inativos do conjunto Treino e Teste segundo SIMCA.

A análise das PCs, para a classe dos compostos ativos, sugere que inibidores potentes têm valores negativos de PC1 e PC2, ou seja, eles apresentam valores intermediários de eletronegatividade (JGI4, BEHe3) e presença do fragmento C-O a distância topológica de 06 ou 07 (B06[C-O] e B07[C-O]).

Conclusão

Os modelos quimiométricos apresentam bom poder preditivo e fornecem informações importantes acerca dos requisistos físico-químico e estruturais que influenciam a atividade biológica de derivados de azol frente a *M. perniciosa*.

Agradecimentos

FAPESB, FINEP, CNPq

¹ 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;

² Oliveira, M. L.; Luz, E. D. M. N., 2005. CEPLAC/ CEPEC/SEFIT, p. 132, Ilhéus.

³ Mota, S.G.R., Barros, T. F., Castilho, M. S. Livro de resumos 31^a
Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2008, QB011.