

Síntese, estrutura e atividade bactericida de (Z)-N-(2-ciano-3-fenilalil)benzenossulfonamida.

Eder do Couto Tavares^{1*} (PG), Carlos Henrique Callegario Zacchi¹ (IC), Mayura Marques Magalhães Rubinger¹ (PQ), Daniele Cristiane Menezes¹ (PQ), Lourival R. de Sousa Neto² (IC), Drielly Aparecida Paixão² (IC), Silvana Guilardi² (PQ).

¹ Departamento de Química, CCE, UFV, Viçosa, MG; ² Instituto de Química, UFU, Uberlândia, MG.

* eder.tavares@ufv.br

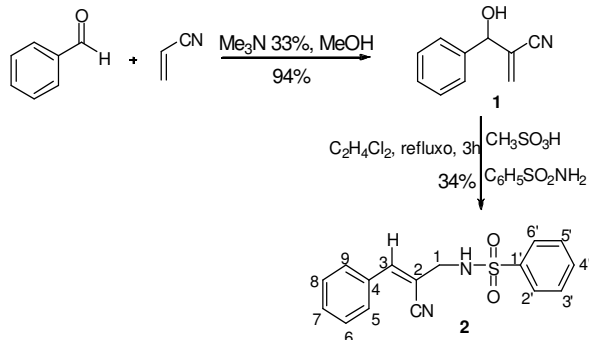
Palavras Chave: Adutos de Baylis-Hillman, sulfonamidas, bactericidas, difração de raios X.

Introdução

A reação de Baylis-Hillman, um dos mais versáteis métodos de formação de ligações C-C, permite a síntese em uma única etapa de produtos quirais funcionalizados. Esses adutos podem ser intermediários para a preparação de produtos biologicamente ativos¹. O desenvolvimento de resistência às drogas existentes é um problema para a terapia antibacteriana e exige a continuidade da pesquisa por novas classes de bactericidas². Neste contexto, destaca-se a química das sulfonamidas, fontes de *sintons* para a preparação de novos antibióticos³. Este trabalho descreve a síntese, caracterização estrutural e avaliação da atividade bactericida do composto inédito (Z)-N-(2-ciano-3-fenilalil)benzenossulfonamida.

Resultados e Discussão

O esquema 1 mostra a rota sintética utilizada⁴.



Esquema 1. Rota sintética

A síntese do aduto **1** já está descrita na literatura⁵. A substância inédita **2** (p.f. = 98,9-99,1°C) foi caracterizada por espectrometria de massas, espectroscopias no IV e de RMN de ¹H e ¹³C e por difração de raios X. O espectro de massas apresentou o pico do íon molecular em m/z = 298, e o pico base em m/z = 77. No seu espectro no IV, observaram-se bandas em 2214 e 3267 cm⁻¹, referentes às vibrações do grupo nitrila e C=C, respectivamente. Um simpleto em δ 3,94 no espectro de RMN de ¹H de **2** foi atribuído aos hidrogênios de C-1, correlacionado ao sinal em δ 47,21, no espectro de RMN de ¹³C. De acordo com a literatura,⁴ no espectro de RMN de ¹H de alquenos trissubstituídos análogos, sinais de hidrogênios β-

vinílicos *trans* ao grupo nitrila aparecem em δ 7,6, como observado no espectro de **2**. A estereoquímica Z proposta para o composto **2** foi confirmada por experimentos de difração de raios X, sendo o ângulo entre o plano dos anéis fenílicos de 47,02(7)°. Este composto cristaliza no sistema monoclinico, grupo espacial P2₁/a. No empacotamento cristalino há ligações de hidrogênio do tipo N-H...N entre duas moléculas relacionadas por um centro de inversão. Os dímeros são mantidos por forças de van der Waals. Observa-se, ainda, uma interação intramolecular do tipo C-H...O.

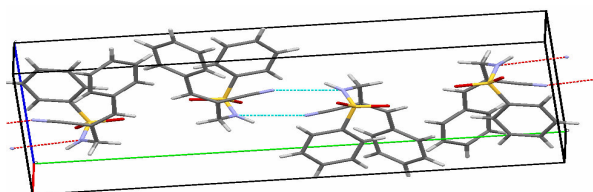


Figura 1. Empacotamento cristalino do composto **2**

A atividade bactericida de **2** foi avaliada pelo teste de difusão em ágar contra as bactérias Gram-positivas e Gram-negativas *Staphylococcus aureus* e *Escherichia coli*. O composto **2** foi ativo contra *E. coli* apresentando halo de inibição de 15 mm em relação ao controle e contra *S. aureus* apresentando halo de 12 mm.

Conclusões

O composto inédito (Z)-N-(2-ciano-3-fenilalil)benzenossulfonamida sintetizado teve sua estrutura determinada por espectroscopias no IV, de RMN e difração de raios X, e foi ativo contra bactérias Gram-positivas e Gram-negativas. Como próxima etapa, será determinada a concentração mínima inibitória contra uma gama de microrganismos patogênicos.

Agradecimentos

Ao CNPq, CAPES e FAPEMIG por bolsas de estudos. Ao prof. Dr. Javier Ellena (IFSC-USP) pelas medidas de raios X.

¹ Basavaiah et al. *Chemical Society Review*. **2007**, 35, 1581-1588.

² Nag et al. *Bioorg. Med. Chem. Letters*. **2006**, 16, 3824-3828.

³ Maren, T.H. *Annu. Rev. Pharmacol. Toxicol.* **1976**, 16, 309-327.

⁴ Hoo Sook Kim et al. *Bull. Korean Chem. Soc.* **2009**, 30, 941-944.

⁵ Juexiao et al. *Organic Letters*. **2002**, 26, 4723-4725.