

QSAR, Voltametria Cíclica e Cálculo de Potenciais de Redução de Lactonas Fitotóxicas Derivadas dos Rubrolídeos

Mateus Ribeiro Lage^{1,2} (PG), José Walkimar de M. Carneiro² (PQ), Maurício Lanznaster² (PQ), Luiz Cláudio A. Barbosa¹ (PQ), Célia Regina Álvares Maltha¹ (PQ)*

**crmaltha@ufv.br*

1 – Laboratório de Análise e Síntese de Agroquímicos (LASA), Departamento de Química, UFV, Viçosa, MG.

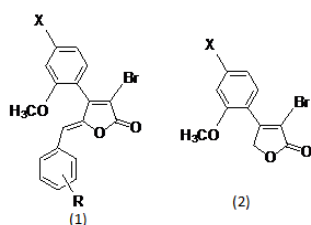
2 – Instituto de Química, Departamento de Química Inorgânica, UFF, Niterói, RJ.

Palavras chave: Rubrolídeos, QSAR, fitotoxicidade, voltametria.

Introdução

Os γ -alquilidenobutenolídeos são compostos orgânicos isolados de fontes naturais que possuem importantes atividades biológicas. Dentre estes compostos destacam-se os rubrolídeos, constituídos por um anel lactônico de cinco membros substituído¹. Os rubrolídeos são compostos que apresentam semelhança estrutural com os nostoclídeos, os quais possuem reconhecida atividade herbicida^{2,3}.

Na presente comunicação reportamos resultados de análise estrutural, cálculo de potencial de redução e correlação com potência biológica de uma série de 13 derivados rubrolídeos, com estrutura geral mostrada abaixo, os quais foram sintetizados em nosso grupo e cuja atividade fitotóxica foi quantificada.



X = H, F

R = CF₃, NO₂, H, -OCH₂O-

Resultados e Discussão

Os ensaios biológicos *in vitro* foram realizados para a obtenção dos valores de IC₅₀, um dos parâmetros para avaliação de fitotoxicidade dos compostos. Os resultados mostraram que os derivados nitrados e trifluorados foram os mais ativos.

Para estabelecer a influência dos substituintes sobre a atividade dessa classe de compostos, realizamos um estudo QSAR baseado em propriedades calculadas. Cada composto foi submetido a uma análise conformacional e a conformação mais estável foi empregada para cálculos dos descritores moleculares (AM1). As correlações foram obtidas com o pacote CODESSA, o qual indicou que a energia dos

orbitais de fronteira é um parâmetro relevante para a eficiência (Fig. 1).

Esta correlação indica que os rubrolídeos provavelmente agem por um processo de oxi-redução. Por esta razão foram medidos os potenciais de redução por voltametria cíclica, os quais reforçaram os resultados de QSAR, indicando que os compostos com maior potencial de redução são os mais eficientes.

Adicionalmente, foram calculados os potenciais de redução (mPWB1K/TZVP) da série de compostos em fase gás e em fase líquida (água e DMSO). Uma vez mais os resultados reforçam a importância do potencial de redução como parâmetro relevante para determinação da eficiência fitotóxica dos rubrolídeos, confirmando suposições anteriores.

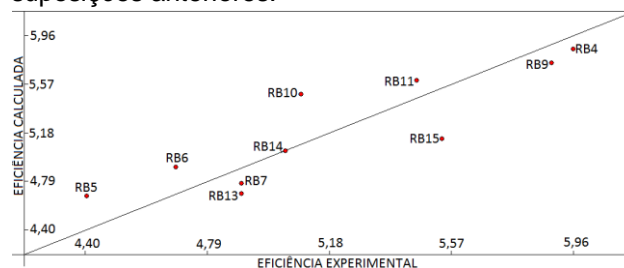


Figura 1. Gráfico de eficiência calculada versus experimental usando energia do HOMO como variável independente ($n = 10$, $R^2 = 0,76$, $s^2 = 0,07$).

Conclusões

Modelos QSAR mostram que energias dos orbitais de fronteira têm correlação com a eficiência fitotóxica dos rubrolídeos, indicando que estes compostos agem por um processo de oxi-redução. Medidas dos potenciais de redução por voltametria cíclica e cálculos DFT reforçam os resultados prévios.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e FAPEMIG.

¹ Barbosa, L. C. A.; Teixeira, R. R.; Pinheiro, P. F.; Maltha, C. R. A. e Demuner, A. J. *Quím. Nova.* **2010**, *33*, 1163.

² Teixeira, R. R.; Barbosa, L. C. A.; Forlani, G.; Veloso, D. P. e Carneiro, J. W. M. *J. Agric. Food Chem.* **2008**, *56*, 2321.

³ Barcelos, R. C. Dissertação de Mestrado, UFV, **2009**.