

Síntese e Caracterização por Difração de Raios X de uma Isobenzofuranona Análoga ao Ácido Crifonétrico

Wagner L. Pereira¹ (PG), Deborah C. Tomaz¹ (IC), Róbson R. Teixeira¹ (PQ)*, Drielly A. Paixão² (PG), Thiago B. Mello² (IC), Javier Ellena³ (PQ), Silvana Guilardi² (PQ)

¹Universidade Federal de Viçosa, Viçosa - Minas Gerais

²Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia - Minas Gerais

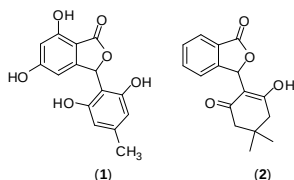
³Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos - São Paulo

*robsonr.teixeira@ufv.br

Palavras Chave: ácido crifonétrico, isobenzofuranona, difração de raios X.

Introdução

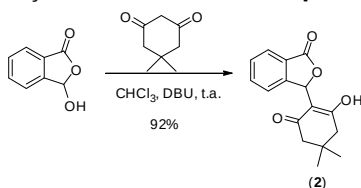
A toxina natural conhecida como ácido crifonétrico (**1**) foi isolada como o componente majoritário do extrato bruto AcOEt, obtido do cultivo em MPGA produzido pelo fungo *Endothia parasitica* (Murr.).¹ A atividade fitotóxica do ácido **1** foi brevemente avaliada e observou-se que na concentração de 100 $\mu\text{mol L}^{-1}$ ele é capaz de inibir completamente o crescimento de sementes de tomate.¹



Descreve-se nesse trabalho a síntese e a caracterização por difração de raios X da isobenzofuranona **2** estruturalmente similar ao ácido crifonétrico (**1**). Essa substância foi preparada com o propósito de avaliar o efeito inibitório de um grupo de isobenzofuranonas sobre o transporte de elétrons da fotossíntese³, visando o desenvolvimento de novos herbicidas utilizando como estrutura-modelo a toxina natural (**1**).

Resultados e Discussão

A síntese da substância **2** foi realizada via reação de condensação entre a 3-hidroxiisobenzofuran-1(3H)-ona e a 5,5-dimetilcicloexano-1,3-diona (dimedona),² de acordo com as condições mostradas no Esquema 1.



Esquema 1. Síntese da isobenzofuranona **2**.

O composto **2** foi completamente caracterizado por técnicas espectroscópicas (IV e RMN), espectrometria de massas bem como difração de raios X. No espectro de RMN de ¹H (400 MHz, MeOD), os sinais para os hidrogênios aromáticos foram observados em 7,81 (d, 1H, J=7,6Hz); 7,65 (t, 1H, J=7,6 Hz); 7,50 (t, 1H, J=7,6 Hz) e 7,30 (t, 1H, J=7,6 Hz). Os demais hidrogênios foram observados como simpletos em 6,70 (-OCH-, 1H); 2,34 (2x-CH₂-, 4H) e 1,09 (2xCH₃, 6H). A fórmula molecular da substância **2** (C₁₆H₁₇O₄) foi confirmada por espectrometria de massas de alta resolução 35ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

(HRMS-ESI, [M+H]⁺ calculado 273,1127; encontrado 273,1131). Os dados espectroscópicos de RMN de ¹³C e no IV estão em acordo com os dados previamente descritos na literatura.²

O composto **2** cristaliza no sistema triclinico, grupo espacial P1̄, com duas moléculas por unidade assimétrica (Figura 1). As moléculas **a** e **b** correspondem à forma enólica da substância **2**. Na molécula **b** há uma deslocalização de elétrons no sistema conjugado carbonila-enol. Os hidrogênios H1b e H2b ficam sobre centros de inversão e estão ligados a dois átomos de oxigênio. Desta forma, as moléculas **b** formam uma rede bidimensional através de interações lineares O1b-H1b...O1b e O2b-H2b...O2b, na direção [101], com distâncias O – O de 2,505(4) Å e 2,520(5) Å respectivamente. No empacotamento cristalino, cada molécula **a** faz duas interações intermoleculares C-H...O com duas moléculas **b** de diferentes redes.

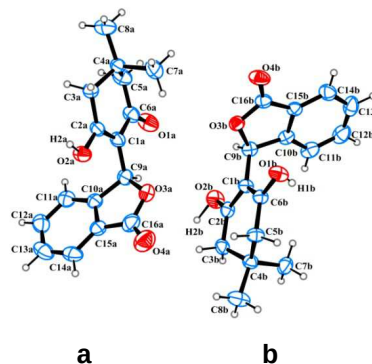


Figura 1. Representação ORTEP-3 do composto **2**.

Conclusões

A síntese e elucidação estrutural de um composto supramolecular foram realizadas com sucesso. Testes biológicos *in vitro* para avaliação da atividade inibitória de **2** sobre a fotossíntese serão realizados.

Agradecimentos

FUNARBE, FAPEMIG e CAPES.

¹ARNONE, A.; ASSANTE, G.; NASINI, G.; STRADA, S.; VERCESI, A. *J. Nat. Prod.* **2002**, 65, 48-50.

²MAL, D.; PAHARI, P.; RANJAN, D. S. *Tetrahedron* **2007**, 63, 11781-11792.

³TEIXEIRA, R. R.; PINHEIRO, P. F.; BARBOSA, L. C. A.; CARNEIRO, J. W. de M.; FORLANI, G. *Pest. Manag. Sci.* **2010**, 66, 196-202.