

Síntese e caracterização estrutural por difração de Raios X de isobenzofuranonas metoxiladas

Jorge L. Pereira¹ (PG), Júnior F. Arantes¹ (IC), Drielly A. Paixão² (PG), Thiago B. Mello² (IC), Silvana Guilardi² (PQ)*, Róbson R. Teixeira¹ (PQ)

¹ Universidade Federal de Viçosa, Viçosa – Minas Gerais

² Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia - Minas Gerais

*silvana@ufu.br

Palavras Chave: Difração de Raios X, isobenzofuranonas, orto-alquilação

Introdução

Microorganismos como fungos e bactérias produzem uma variedade de metabólitos secundários, que apresentam atividade fitotóxica e reguladora do crescimento de plantas.¹ Dentre esses diversos metabólitos, menciona-se a fitotoxina 4-metoxi-5-metil-6-(3-metil-2-eniloxi)isobenzofuran-1(3H)-ona (**1**) isolada a partir da espécie fúngica *Nimbya alternantherae* (**Fig. 1**).² Ensaio biológicos conduzidos *in vitro* com (**1**) mostraram que esta substância é capaz de inibir o transporte de elétrons fotossintéticos.² Levando-se em conta um programa de pesquisa voltado para o desenvolvimento de novos agentes químicos para o controle de plantas daninhas empregando-se a fitotoxina **1** como modelo, o objetivo deste trabalho é descrever a síntese e caracterização estrutural por difração de raios X das isobenzofuranonas **2** e **3** (**Fig. 1**).

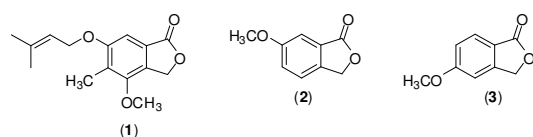
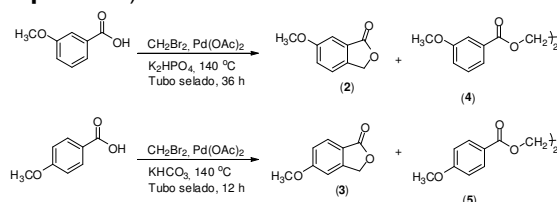


Figura 1. Estruturas das isobenzofuranonas **1** a **3**.

Resultados e Discussão

As substâncias **2** e **3** foram sintetizadas via reações de *orto* alquilação,³ catalisadas por Pd(OAc)₂, entre dibromometano e ácidos carboxílicos, resultando na formação das isobenzofuranonas **2** e **3** com, respectivamente, 69% e 40% de rendimento (**Esquema 1**).



Esquema 1. Síntese das isobenzofuranonas **2** e **3**.

As separações cromatográficas em coluna de sílica gel resultaram também no isolamento dos diésteres **4** e **5**, resultantes de processos de substituição nucleofílica bimolecular. Os compostos **2** e **3** foram completamente caracterizados por espectroscopia

no IV e de RMN, espectrometria de massas e difração de Raios X.

Os compostos **2** e **3** (**Fig. 2**) cristalizam no sistema monoclinico, grupo espacial P2₁/c. Em ambos, a molécula é planar com desvio máximo de 0,016 (2) Å e 0,010(2) Å respectivamente, do plano traçado por todos os átomos, exceto os hidrogênios.

No composto **2** a interação intermolecular C9–H9···O2, entre duas moléculas relacionadas por um centro de inversão, leva à formação de dímeros que são mantidos por forças de Van der Waals. No empacotamento cristalino do composto **3** a interação intermolecular C6–H6···O1 forma uma rede bidimensional na direção [101] e a interação C8–H8···O2 liga as camadas ao longo do eixo cristalográfico *c*. Este comportamento é observado no composto correlato,⁴ que apresenta dois substituintes metoxila no anel benzênico.

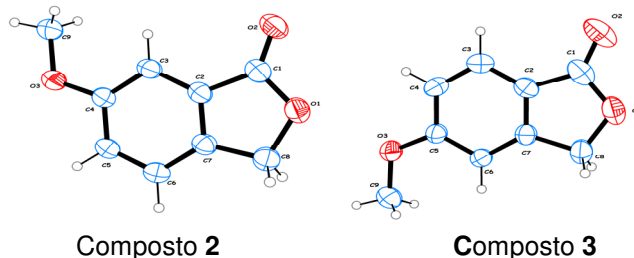


Figura 2. Representação ORTEP3 dos compostos **2** e **3**.

Conclusões

Monocristais de isobenzofuranonas metoxiladas foram obtidos para estudos por difração de raios X. A posição do substituinte metoxila não afeta a planaridade da molécula, mas afeta o empacotamento cristalino.

Agradecimentos

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

¹ Strange, R. N. *Nat. Prod. Rep.* **2007**, 108, 127.

² Demuner, A. J. et al. *Bioch. Syst. Ecol.* **2006**, 34, 790.

³ Zhang, Y.H.; Shi, B. F.; Yu, J. Q. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, 48, 6097.

⁴ Wang, Z.; Wei, L.; Li, M.; Wang, J. *J. mol. Struct.* **2008**, 879, 150-155.