

Síntese, caracterização e atividade antifúngica de (Z)-2-(metoxicarbonil)-3-fenilalil-(4-clorofenil)sulfonilcarboimidoditioato de tetrafenilfosfônio

Eder C. Tavares¹ (PQ)*, Mayura M. M. Rubinger² (PQ), Marcelo R. L. Oliveira² (PQ), Dorila Piló Veloso² (PQ), Laercio Zambolim² (PQ)

* eder@unifei.edu.br

¹Universidade Federal de Itajubá, Itajubá-MG; ²Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG, ³Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte-MG.

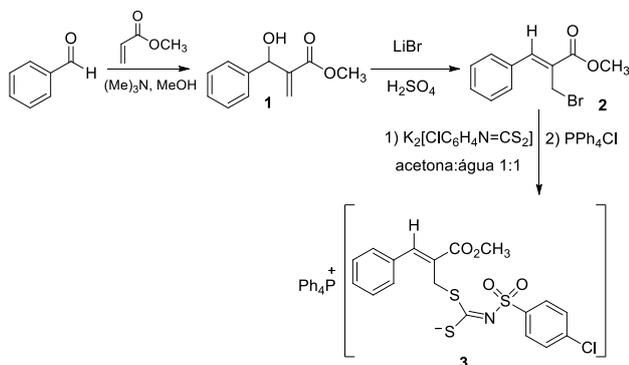
Palavras Chave: alilditiocarbimato, fungicida, sínteses orgânicas

Introdução

A reação de Morita-Baylis-Hillman, um versátil método de formação de ligações C-C, permite a síntese em uma única etapa de produtos funcionalizados. Esses adutos podem ser intermediários para a preparação de produtos biologicamente ativos.¹ Este trabalho descreve a síntese, caracterização e avaliação da atividade antifúngica de (Z)-2-(metoxicarbonil)-3-fenilalil-(4-clorofenil)sulfonilcarboimidoditioato de tetrafenilfosfônio a partir de um brometo de Morita-Baylis-Hillman e (4-clorofenilsulfonil)ditiocarbimato de potássio. Outro objetivo do trabalho foi a avaliação do potencial antifúngico do inédito alilditiocarbimato. O desenvolvimento de resistência aos fungicidas comerciais é um problema para a agricultura, sendo importante a pesquisa por novos fungicidas.²

Resultados e Discussão

O esquema 1 mostra a rota sintética utilizada.



Esquema 1. Rota sintética utilizada.

A síntese do aduto **1**³ e do brometo **2**⁴ estão descritas na literatura. O composto inédito **3** (pf= 61,9-62,5 °C) foi caracterizado por HR-ESI-MS, espectroscopias no infravermelho e de RMN de ¹H e ¹³C. O espectro de massas no modo negativo do composto **3** apresentou um pico de valor de $m/z = 439,9871$, que é compatível com a fórmula molecular do ânion $\text{C}_{18}\text{H}_{15}\text{ClNO}_4\text{S}_3^{2-}$. Seu espectro no infravermelho apresentou bandas em 1703 cm^{-1} , 1363 cm^{-1} , 1265 e 1140 cm^{-1} e 945 cm^{-1} referentes aos estiramentos das ligações C=O de éster, C=N, $\text{SO}_{2\text{ass}}$ e $\text{SO}_{2\text{sim}}$ e $\text{CS}_{2\text{ass}}$, respectivamente.

37ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

No espectro de RMN de ¹H de **3** um simpleto em δ 4,20 foi atribuído aos hidrogênios metilênicos CH_2 , correlacionado ao sinal em δ 33,8 no espectro de RMN de ¹³C. Os sinais do cátion tetrafenilfosfônio apareceram como dupletos no espectro de ¹³C e os sinais em δ 168,5 e δ 202,6 foram atribuídos ao átomo de carbono da carbonila do éster α,β -insaturado e do carbono do grupo C=N, respectivamente. Os demais sinais estão de acordo com a estrutura proposta. A estereoquímica Z foi determinada por experimentos de NOEdif.

A atividade antifúngica de (**3**) foi avaliada pelo teste *Poisoned food* contra *Botrytis cinerea*, causador de mofo cinzento em morangos. O composto **3** apresentou um valor de IC_{50} de 94 μM sendo mais ativo que o brometo de Morita-Baylis-Hillman precursor **2** que na concentração de 0,5 mmol L^{-1} inibiu apenas 44% e menos ativo que o fungicida comercial dimetilditiocarbamato de zinco.

Conclusões

Foi sintetizado o composto (Z)-2-(metoxicarbonil)-3-fenilalil-(4-clorofenil)sulfonilcarboimidoditioato de tetrafenilfosfônio. O inédito alilditiocarbimato **3** foi completamente caracterizado por HR-ESI-MS, espectroscopia no IV, RMN de ¹H e ¹³C. O novo composto foi ativo contra *Botrytis cinerea*. Esses estudos serão aprofundados com a determinação do IC_{50} para outros microorganismos.

Agradecimentos

FAPEMIG, CAPES e CNPq.

¹BASAVIAIAH, D *et al.* The Baylis-Hillman reaction: a novel concept for creativity in chemistry. *Chemistry Society Review*, v. 44, p. 68-78, 2012.

²BRADER, L. Needs and directions for plant protection in developing countries: the FAO view. *FAO Plant Protection Bulletin*, v.36, p.2-8, 1988.

³CAL, J *et al.* Dramatic rate acceleration of the Baylis-Hillman reaction in homogeneous medium in the presence of water. *Organic Letters*, v.4, p. 4723-4725, 2002.

⁴FERREIRA, M *et al.* A Highly Efficient and General Method for the Preparation of (Z)-Allylic Bromides Derived from Morita-Baylis-Hillman Adducts. *J. Braz. Chem. Soc.*, v. 20, p. 564-568, 2009.