

Synthesis, characterization and antifungal activity of $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{Sn}(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_3\text{SO}_2\text{N}=\text{CS}_2)_2]$ a novel tin(IV) complex.

Silvana Guilardi¹ (PQ), Rafael A. C. Souza¹ (PG), Lucius F. O. B. Filho² (PG), Liany D. L. Miranda² (PG), Laércio Zambolim (PQ)² Mayura M. M. Rubinger² (PQ), Marcelo R. L. Oliveira² (PQ).

silvana@ufu.br

¹Universidade Federal de Uberlândia, Av. João Naves de Ávila 2121, 38408-100, Uberlândia, MG, Brasil

²Universidade Federal de Viçosa, Av. Peter Henry Rolfs s/n, 36570-900, Viçosa, MG, Brasil

Palavras Chave: Organometálicos de estanho(IV), atividade antifúngica, difração de Raios X

Abstract

The complex was obtained by the reaction of the potassium *N*-CH₃-sulfonyldithiocarbamate and tetraphenylphosphonium chloride with dimethyltin dichloride. The compound was characterized by elemental analyses, NMR, vibrational spectroscopy and X-ray diffraction. The *in vitro* antifungal activity of the complex was evaluated and this compound was active against the fungi *Botrytis cinerea* and *Colletotrichum acutatum*.

Introdução

Complexos de ditiocarbamatos (R_2NCS_2^-) são mundialmente utilizados como agrotóxicos, devido à sua baixa toxicidade, alta atividade e baixo custo de produção. Nosso interesse na síntese de complexos de estanho(IV) com ditiocarbamatos ($\text{RN}=\text{CS}_2^{2-}$) se deve às suas semelhanças com os análogos ditiocarbamatos e a recente descoberta da atividade antifúngica de complexos de sulfonilditiocarbamatos de estanho contra *Colletotrichum gloeosporioides*¹. Este trabalho se insere em um projeto que visa o estudo da atividade fungicida de novas substâncias derivadas de ditiocarbamatos.

Resultados e Discussão

A síntese foi realizada adicionando-se $(\text{CH}_3)_2\text{SnCl}_2$ (1,0 mmol) a uma solução de $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{N}=\text{CS}_2\text{K}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (2,0 mmol) em água (20 ml). Após 30 min de agitação, foi adicionado cloreto de tetrafenilfosfônio (2,0 mmol) e a mistura foi agitada durante 1,5 h à temperatura ambiente. Em seguida, a mistura foi filtrada e o sólido branco obtido lavado com água destilada, seco sob pressão reduzida e recristalizado em acetona/água 3:1. O composto foi caracterizado por análises de CHN, espectroscopias no infravermelho e de RMN, e difração de raios X. Os dados de raios X foram coletadas em um difratômetro Enraf-Nonius KappaCCD, usando radiação $\text{MoK}\alpha$ (0,71073 Å), e corrigidos pelos fatores de Lorentz e polarização. A estrutura foi resolvida por métodos diretos e refinada por mínimos quadrados (F^2), utilizando matriz completa. O composto cristaliza com uma molécula de água, no sistema monoclínico e grupo espacial $\text{P}2_1/\text{n}$. O átomo de Sn (IV) está coordenado por dois grupos metil e por dois ligantes ditiocarbimato atuando

como bidentados (S,N) numa geometria octaédrica distorcida (Figura 1). As distâncias Sn-N são diferentes [2,495(3) Å e 2,760(4) Å] e as Sn-S são quase iguais e estão de acordo com os valores apresentados para complexos de dimetilestanho (IV). As distâncias Sn-C são consistentes com a literatura^{2,3}. As ligações C-N apresentam caráter significativo de ligação dupla.

Além das interações entre íons de cargas opostas, ocorrem interações intermoleculares entre cátions e ânions do tipo C-H...S e C-H...O bem como C-H...π entre cátions. A molécula de água faz interações O-H...O e O-H...S com ânions.

O composto foi ativo contra os fungos *Botrytis cinerea* ($\text{IC}_{50} = 24 \mu\text{M}$) e *Colletotrichum acutatum* ($\text{IC}_{50} = 507 \mu\text{M}$). Sendo, no primeiro caso, mais ativo que o ziram (fungicida de controle) que apresentou $\text{IC}_{50} = 212 \mu\text{M}$ para *B. cinerea* e 361 μM para *C. acutatum*.

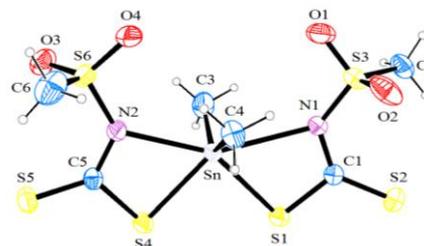


Figura 1. Representação ORTEP-3 do ânion do sal em estudo (elipsóides com 20% de probabilidade).

Conclusões

Um novo sal de dimetilestanho (IV) com ditiocarbimato foi obtido e caracterizado. O composto se mostrou ativo contra os fungos *Botrytis cinerea* and *Colletotrichum acutatum*.

Agradecimentos

À CAPES, CNPq, FAPEMIG e Rede Mineira de Química. Ao prof. Dr. Javier Ellena (IFSC-USP) pelas medidas de raios X.

¹L.C. Dias, M.M.M. Rubinger, J.P. Barolli, J.D. Ardisson, I.C. Mendes, G.M. Lima, L. Zambolim, M.R.L. Oliveira, Polyhedron, 47 (2012) 30-36.

²M.N. Xanthopoulou, S.K. Hadjikakou, N. Hadjiliadis, M. Schurmann, K. Jurkschat, A. Michaelides, S. Skoulika, T. Bakas, J. Binolis, S. Karkabounas, K. Charalabopoulos, J. Inorg. Biochem. 96 (2003) 425-434.

³C. Ma, J. Zhang, G. Tian, R. Zhang, J. Organomet. Chem. 690 (2005) 519-533.