

AVALIAÇÃO DA ATIVIDADE BIOLÓGICA, ESTUDOS ESTRUTURAIS E MODELAGEM MOLECULAR DE COMPOSTOS DERIVADOS TIOFÊNICOS FRENTE AO FUNGO *Glomerella cingulata* CAUSADOR DA PODRIDÃO DA UVA MADURA

Jonathan C. C. Pimentel^{1*}, Mariano A. Pereira^{2, 3}, Tatiane L. Balliano

1. Bolsista, PIBIC. Instituto de Química e Biotecnologia, UFAL. *jonathancorreia_12@hotmail.com

2. Prof. Dr. Instituto de Química e Biotecnologia, UFAL

3. Profa. Dra. Instituto de Química e Biotecnologia, UFAL

Palavras Chave: *Glomerella cingulata*, fungicidas, estrutura.

Introdução

A Uva (*Vitis vinifera* L.) pertence à família Vitaceae (Ampelidaceae), é um fruto dispostos em bagas que possui grande importância terapêutica, bem como comercial.

Segundo dados do IBGE de 2012, o Brasil chegou a produzir aproximadamente, 1,5 toneladas de uva, onde estas foram cultivadas principalmente nas regiões Sul, Sudeste e Nordeste, atingindo até 82.500 hectares de área ocupada com esta cultura, o que torna evidente seu destaque econômico. No entanto, a produtividade de uva pode ainda ser aumentada, pois existem pragas e doenças que ainda causa grandes perdas nessa cultura, chegando em alguns casos à perda total da lavoura.

O presente projeto pretende identificar através de ensaios *in vitro*, estudos estruturais e modelagem molecular, a partir de uma coleção de compostos (25) tiofênicos, possíveis candidatos a fungicidas que apresentem potência e seletividade elevada e baixa toxicidade, corroborando para o aumento da produtividade da uva e disponibilizando mais uma opção para o controle químico da doença acima já citada.

Resultados e Discussão

A primeira etapa do presente trabalho foi a determinação estrutural da substância intitulada de SB200. A estrutura estudada do ponto de vista cristalológico através do uso de técnicas de raios X aplicada à amostras monocristalinas pertence ao sistema cristalino monoclinico e com grupo espacial P21/n. Ela apresenta distâncias e ângulos interatômicos sem nenhuma discrepância, ou seja, com valores bem próximos aos previstos na literatura para este tipo de composto. A molécula apresenta duas regiões planares bem distintas e as quatro moléculas são mantidas no retículo cristalino através de uma ligação de hidrogênio clássica.

Na segunda etapa foi realizado um trabalho de modelagem molecular para a estrutura da SB200 obtida experimentalmente através da difração de raios X e a modelagem molecular da estrutura que sofreu otimização de energia. Nesse processo foram calculadas as propriedades físico-químicas para ambas as estruturas.

Embora a estrutura cristalográfica e a estrutura otimizada sejam a mesma molécula e dessa forma possuem a mesma fórmula molecular, elas apresentam

conformações diferentes. Essa diferença na conformação acarretou em uma pequena discrepância nos valores das propriedades físico-químicas.

A estrutura cristalográfica ficou praticamente plana, enquanto que a estrutura otimizada possui uma torção no meio da cadeia que faz com que ela perca a planaridade. Um dos motivos para a estrutura cristalográfica possuir essa conformação e não a que foi proposta pelo Hyperchem é devido ao empacotamento cristalino que envolve interações intermoleculares. Por outro lado, nos cálculos quânticos esses fatores não são levados em conta e os cálculos são feitos sem que as moléculas recebam influências externas. As interações intermoleculares são responsáveis pelo comportamento e propriedades das moléculas, além de explicar a existência do estado condensado da matéria (sólido e líquido).

Conclusões

Através de estudos cristalográficos pudemos determinar a estrutura da SB200 e compara-la com os dados obtidos pela modelagem molecular. Concluímos que os dados obtidos pelo Hyperchem não apresentam uma grande divergência com os dados cristalográficos de forma geral. Sendo assim, podemos inferir que os cálculos semi-empíricos e os de mecânica molecular apresentaram dados consideravelmente aceitáveis dentro do nosso estudo.

CHANG, Raymond. Química Geral: conceitos essenciais. 4ed. Porto Alegre: AMGH, 2010.

Enraf-Nonius, COLLECT, Nonius BV, Delft, *The Netherlands*, 1997.

Farrugia LJJ (1997). *ORTEP3* for Windows. *J Appl Cryst* 30: 565.

Farrugia LJJ (1999). WinGX. WinGX suite for small-molecule single-crystal crystallography. *Appl Crystallogr* 32: 837-838.

Otwinowski Z, Minor W, Denzo HKL, Scalepack (1997) in: Carter Jr CW, Sweet RM. (Eds.), *Methods in Enzymology*, vol. 276, Academic Press, New York, pp. 307-326.

RODRIGUES, Carlos. Processos Modernos no Desenvolvimento de Fármacos: Modelagem Molecular. Química Nova na Escola, nº3, 2001.

SANT'ANNA, Carlos. Métodos de Modelagem Molecular para Estudo e Planejamento de Compostos Bioativos: Uma Introdução. Revista de Química, 2009.

Sheldrick GM (1997). *SHELXS-97*. Program for crystal structure resolution. Univ. of Göttingen: Göttingen, Germany.