ESTUDO MIA- QSAR DE 1,3,4- OXADIAZÓIS PARA CONTROLE DE XANTHOMONAS AXONOPODIS PV. CITRI

V Congresso Online Nacional de Química, 1ª edição, de 19/06/2023 a 22/06/2023
ISBN dos Anais: 978-65-5465-023-6
DOI: 10.54265/NWQU2378

PEREIRA; Ingrid Vittoria [1], FREITAS; Matheus Puggina de [2]

RESUMO

Xanthomonas axonopodis pv. citri (*Xac*) é uma bactéria gram negativa causadora da doença cancro cítrico que afeta culturas de citrus, tais como laranja e limão, atingindo caule, raiz, folhas e frutos e causando grandes perdas econômicas. As práticas de manejo incluem poda, queima de galhos infectados, desenvolvimento de variedades resistentes à doença e controle químico por meio do uso de agroquímicos. Reportamos aqui um estudo quantitativo de relação estrutura-atividade (QSAR) de três séries de derivados de 1,3,4-oxadiazóis agrupados em um único conjunto de dados[1,2,3], com o objetivo de gerar um modelo preditivo para estimar a atividade antibacteriana de novos análogos. Para o desenvolvimento do modelo, foram utilizados descritores moleculares de análise de imagem multivariada (MIA) baseados na eletronegatividade de Pauling (ε). O conjunto de dados foi dividido em conjunto de treinamento (75%) e conjunto teste (25%) de acordo com a amostragem de Kennard-Stone. Os efeitos dos substituintes foram analisados utilizando-se os gráficos de MIA-plot, que indicam como diferentes substituintes e suas respectivas posições afetam a propriedade biológica. O gráfico de coeficientes de regressão do PLS (**b**) indica como uma variável afeta positivamente ou negativamente a resposta biológica, enquanto o gráfico de scores da importância das variáveis de projeção (VIP) informa sobre a magnitude da influência de cada substituinte nos dados. Os cálculos foram realizados utilizando o programa Chemoface. O modelo demonstrou alto desempenho de modelagem, com r^2 = 0,88, q^2 = 0,82, $^c r^2_p$ = 0,742, r^2_{pred} = 0,91 r^2_m = 0,763 e CCC = 0,949. Para descobrir se os resultados dependem ou não da seleção do conjunto teste, a estabilidade do modelo foi avaliada selecionando 10 conjuntos teste de forma randômica, confirmando que o modelo é preditivo e estável. Por meio da análise dos gráficos MIA-plot, concluiu-se que cadeias longas com anel piridina aumentam a atividade biológica, enquanto o enxofre oxidado desfavorece a bioatividade. Os substituintes 3-Cl, 3-NO_2 e 4-CH_3 favorecem a bioatividade, enquanto o anel quinazolina a diminui. Com esses resultados, conclui-se que estudos dessa natureza são fundamentais para o desenvolvimento de moléculas com atividades antibacterianas, levando-se em conta que doenças com cancro cítrico são de difícil controle e requerem muita atenção dos produtores para o tratamento. Os autores agradem aos orgãos de fomento CAPES ,CNPq e FAPEMING . 1. Wang, P. Y.; Zhou, L.; Zhou, J.; Wu, Z. B.; Xue, W.; Song, B. A.; Yang, S. 2016. Synthesis and antibacterial activity of pyridinium-tailored 2,5-substituted-1,3,4-oxadiazole thioether/sulfoxide/sulfone derivatives. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 26, 1214-1217. 2. Wang, P. Y.; Zhou, L.; Zhou, J.; Fang, H. S.; Wu, Z. B.; Xue, W.; Song, B. A.; Yang, S. 2017. Potential antibacterial agents: pyridinium-functionalized amphiphiles bearing 1,3,4-oxadiazole scaffolds. *Chem. Pap.* 71, 1013-1018. 3. Wang, X.; Yan, J.; Wang, M.; Liu, M.; Zhang, J.; Chen, L.; Xue, W. Synthesis and three-dimensional quantitative structure-activity relationship study of quinazoline derivatives

[1] Universidade Federal de Lavras, victoriaingrid864@gmail.com
[2] Universidade Federal de Lavras, matheus@ufla.br

containing a 1,3,4-oxadiazole moiety as efficient inhibitors against *Xanthomonas axonopodis pv. citri*. *Mol. Divers.* 22, 791-802.

PALAVRAS-CHAVE: Atividade antibacteriana, MIA-QSAR, Xanthomonas

[1] Universidade Federal de Lavras, victoriaingrid864@gmail.com
[2] Universidade Federal de Lavras, matheus@ufla.br