

Análise Supramolecular e Superfícies de Hirshfeld do Flavonoide $C_{15}H_{14}O_6$

*Jhonatan Andrade da Cruz¹, Hamilton Barbosa Napolitano²,

¹Graduando em licenciatura em física, (PBTI/UEG) Ciências Exatas e Tecnológicas,
Universidade Estadual de Goiás, jhonatanandcruz@gmail.com ²Docente, Universidade
Estadual de Goiás, Anápolis (GO)

Resumo: A busca por novos fármacos que atuem em rotas bioquímicas ainda não descobertas representam um caminho promissor e de grande estima a química medicinal.

Introdução

Aos flavonoides são atribuídos diversos efeitos biológicos que incluem, entre outros: ação anti-inflamatória, hormonal, anti-hemorrágica, anti-alérgica e anti-câncer. São ainda responsáveis pelo aumento da resistência capilar e também denominados de fator P ou substância P, auxiliando na absorção da vitamina C. Entretanto, o efeito mais importante é a propriedade antioxidante.

Material e Métodos

Metodologia: O trabalho de determinação da estrutura tridimensional através da cristalografia de raios X envolve as seguintes etapas: (1) cristalização (2) coleta de dados, (3) processamento dos dados, (4) resolução da estrutura, (5) refinamento, (6) validação e análise do modelo cristalográfico e (7) depósito no banco de dados apropriado.

Validação e análise: Os erros referentes ao modelo construído são analisados, avaliando-se a precisão e exatidão dos resultados, sendo esta etapa imprescindível para a qualidade e confiabilidade das estruturas resolvidas.

Depósito no banco de dados apropriado: Após a conclusão de todas as etapas descritas anteriormente, o modelo cristalográfico no formato CIF pode ser depositado nos bancos de dados apropriados.

Superfícies de Hirshfeld: A análise da superfície de Hirshfeld avalia tridimensionalmente as características individuais da molécula e fornece a informação sobre a topografia de suas interações intermoleculares, tais elementos auxiliam na compreensão do empacotamento da rede cristalina. Outro parâmetro avaliado nesta análise é o *fingerprint* da molécula, este dado proporciona uma representação gráfica bidimensional e a quantificação das interações intermoleculares. A superfície de Hirshfeld é construída a partir da densidade eletrônica experimental e plotada, através de uma função geométrica em que se obtém o mapeamento das distâncias dos contatos intermoleculares normalizados (d_{norm}), utilizando os valores dos raios de van der Waals dos átomos e as distâncias de e e d_i correspondentes ao comprimento dos contatos próximos externamente e internamente até a superfície. A superfície de Hirshfeld e o *fingerprint* podem ser aplicados como ferramentas úteis na avaliação simples e rápida de diferentes estruturas polimórficas (TARAHOMI et al., 2013). A execução desta análise é realizada através do programa Crystal Explorer (WOLFF, 2012) utilizando o arquivo de formato CIF da estrutura.

Resultados e Discussão

Alguns resultados foram atingidos conforme planejado outrora quando o início da vigência do projeto, podendo-se citar:

- 1- Revisão bibliográfica.
- 2- Fundamentação teórica.
- 3- Formação de conceitos necessários para o entendimento e estudo do trabalho em questão. Tais resultados foram obtidos juntamente com o grupo de química teórica e estrutural de Anápolis (QTEA).

Considerações Finais

A técnica de difração de raios X representa o mecanismo mais adequado para a obtenção das características estruturais de compostos sem possuir informações prévias do cristal em estudo. As etapas que compõe a análise cristalográfica devem ser realizadas de forma cuidadosa, utilizando tecnologias já disseminadas em meio científico, aplicando teorias e postulados já consagrados para a definição do aspecto construtivo de uma molécula.

Referências

CUNHA, S.; Método simples de formação de monocristal de substância orgânica para estudo estrutural por difração de raio-X. Química Nova, v.31, n.4, p.906-909, 2008.

NAPOLITANO, H , B.; CAMARGO, A, J.; MASCARENHAS, Y, P.; VENCATO, I.; LARIUCCI, C.; Análise da difração de Raio X. Revista Processos Químicos, v.1, p.3545, 2007.

FERNANDES, W. B.; NAPOLITANO, H. B.; PÉREZ, C. N.; MARTINS, F. T.; LARIUCCI, C. *Aplicações Tecnológicas da Metodologia Cristalográfica*. Revista Processos Químicos, Goiânia, v. 4, n. 7, p. 19-32, 2010. STOUT, G.; JENSEN, L, H.; *X-Ray Structure Determination*. 2.ed. New York, 1989, p467.

GIACOVAZZO, C.; MONACO, H , L.; VITERBO, D.; SCORDARI, F.; GILLI, G .; ZANOTTI, G .; CATTI, M.; *Fundamentals of Crystallography*. 2.ed. Oxford: IUCr- Oxford University Press, 2002, p. 668.

SHELDRICK, G. M.; “*SHELXS-97 Program for the solution of crystal structures*”. Germany: University of Gottingen, 1990.

ALTOMARE A. A.; CASCARANO, G.; GIACOVAZZO, C.; GUAGLIARDI, A.; “*SIR92 - A program for crystal structure solution*”. J. Appl. Cryst., 1993, v. 26, p. 343-350.

GLUSKER, J. P.; TRUEBLOOD, K. N.; “*Crystal Structure Analysis a Primer*”. 3ª ed., Oxford University Press, 2010.