

# Estudo cristalográfico da 1,3,6,7-tetraidroxixantona-C2- $\beta$ -D-glucosideo, substância natural extraída da casca do caule da *Mangifera indica*.

Lucas R. de Moraes\* (IC)<sup>1</sup>; José W. da Cruz Jr. (IC)<sup>1</sup>; Geraldo A. da Silva (PQ)<sup>2</sup>; Marcelo H. dos Santos (PQ)<sup>2</sup>; Javier Ellena (PQ)<sup>3</sup>; Antonio C. Doriguetto (PQ)<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Laboratório de Cristalografia, Depart. de Ciências Exatas - <sup>2</sup>LABFARMACO, Unifal-MG, Rua Gabriel Monteiro da Silva, 714, CEP 37130-000, Alfenas, MG; <sup>3</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP, CEP 13560-970, São Carlos, SP  
\*e-mail: [lucasquimica@yahoo.com.br](mailto:lucasquimica@yahoo.com.br)

Palavras Chave: mangiferina, cristalográfico, xantona, composto natural.

## Introdução

A mangiferina (Mgf), (1,3,6,7-tetraidroxixantona-C2- $\beta$ -D-glucosideo), é uma substância natural extraída de várias plantas inclusive da *Mangifera indica* (mangueira). Apesar dessa substância já apresentar inúmeros estudos quanto a sua ação biológica, poucos estudos foram feitos em relação às suas características físicas e químicas. Embora sua estrutura molecular<sup>1</sup> já tenha sido determinada, sua estrutura cristalina ainda é desconhecida. Assim a difração de raios X (DRX) por monocristal foi utilizada para se ter acesso à geometria intra e intermolecular da Mgf. A Mgf pura foi obtida a partir de extratos etanólicos (H<sub>2</sub>O/EtOH,1:1) da casca do caule de *M. indica*. Um monocristal de 0,06x0,07x0,27mm<sup>3</sup> foi montado no difratômetro Kappa-CCD da Enraf-Nonius, Mo<sub>K $\alpha$</sub>  ( $\lambda = 0,71073 \text{ \AA}$ ). A estrutura cristalina foi determinada e refinada usando os programas SHELXS-97<sup>2</sup> e SHELXL-97<sup>3</sup>, respectivamente.

## Resultados e Discussão

Os principais parâmetros cristalográficos obtidos são: Grupo Espacial= P1; a = 7,6575(5), b = 11,2094(8), c = 11,8749(8) Å;  $\alpha = 79,967(5)^\circ$ ,  $\beta = 87,988(4)^\circ$ ,  $\gamma = 72,164(4)^\circ$ ; V = 955,3(1) Å<sup>3</sup>; Z = 2; Dens. = 1,63 Mg/m<sup>3</sup>; Reflexões Coletadas = 11605; Reflexões Independentes = 6229 [R(int) = 0,0470]; Parâmetros= 586; R1[ $I > 2\sigma(I)$ ] = 0,0573; wR2[ $I > 2\sigma(I)$ ] = 0,1397; R1[Total] = 0,0768; wR2[Total] = 0,1540; S = 1,032. A estrutura apresenta duas moléculas na unidade assimétrica as quais se interagem por meio de ligação de hidrogênio (Figura1). As duas moléculas na unidade assimétrica diferenciam-se entre si pelos diferentes ângulos de torção dos açúcares D-glucosideo: molécula A 129,28° e molécula B 86,60°. Observou-se também que as hidroxilas das posições O10 e O21 arranjam-se de forma diferente nas duas moléculas, o que muito provavelmente esteja ocasionando as torções dos açúcares e conseqüentemente contribuindo para a existência de duas moléculas na assimétrica. A estrutura apresenta ainda cinco águas de

cristalização independentes por simetria (Figura 2). As posições das águas de cristalização e as várias

ligações de hidrogênio envolvendo água-água, água-molécula A, água-molécula B, molécula A-molécula B, participam do empacotamento cristalino estabilizando a estrutura.

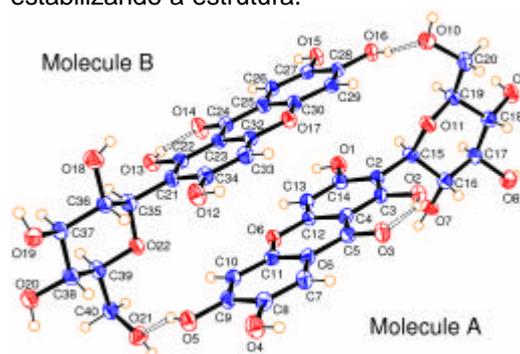


Figura 1: Representação Ortep-3<sup>4</sup> da mangiferina.

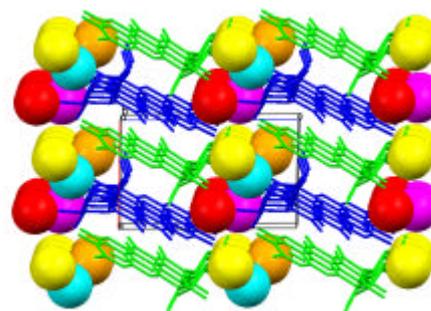


Figura 2 Empacotamento cristalino da mangiferina mostrando as moléculas A e B e águas de cristalização.

## Conclusões

A MGF foi cristalizada e sua estrutura determinada sem ambigüidades por DRX. Suas geometria intra e intermoleculares foram apresentadas.

## Agradecimentos

Ao CNPq, FAPEMIG e FINEP. Ao CNPq/PIBIC pela bolsa de IC a LRM.

- <sup>1</sup> Nott, P. E.; John Roberts, C. *Phytochemistry*, 1967, 6, 741-747
- <sup>2</sup> Sheldrick, G.M. SHELXS-97. Program for Crystal Structure Resolution, University of Go'ttingen, Go'ttingen, Germany, **1997**.
- <sup>3</sup> Sheldrick, G.M. SHELXL-97. Program for Crystal Structures Analysis, University of Go'ttingen, Go'ttingen, Germany, **1997**.
- <sup>4</sup> Farrugia, L.J.J. *Appl. Cryst.* **1997**, 30, 565.