

Conformação e interações moleculares da 1,7-dihidroxi-3,8-dimetoxixantona: um composto natural com interesse biológico

Rodrigo S. Corrêa (PG)¹, Talita E. Souza* (IC)¹, Marcelo J. D. Silva (IC)², Marina M. Mesquita (PG)², Maria E. de C. Moreira (PQ)³, Ana M. M. D. Costa (PQ)³, Tanus J. Nagem (PQ)⁴, Marcelo H. dos Santos (PQ)², Antônio C. Doriquetto (PQ)⁵, Javier Ellena (PQ)¹

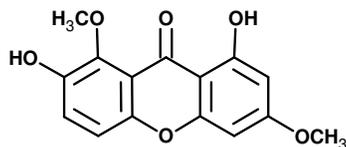
¹ Instituto de Física de São Carlos - USP, Cx. P. 369, 13560-970, São Carlos, SP, ² Lab. de Fitoquímica e Química Medicinal, Depart. de Ciências Exatas - Unifal-MG, 37130-000, Alfenas, MG; ³ Lab. de Fitofármacos, UNIFENAS, 37130-000, Alfenas, MG; ⁴ LAPRONA - ICEB-UFOP, Ouro Preto, MG; ⁵ Lab. de cristalografia, Depart. de Ciências Exatas - Unifal-MG, 37130-000, Alfenas, MG. e-mail: talitaesouza@yahoo.com.br

Palavras Chave: xantona natural, difração de raios X, estrutura cristalina, interações moleculares.

Introdução

Uma das classes de constituintes químicos naturais mais estudados biologicamente é a classe das xantonas que abrange uma importante série de heterociclos oxigenados.^[1] De modo geral, as xantonas são bastante estudadas com relação à sua extração, isolamento e suas propriedades biológicas, porém, pouco se sabe sobre suas propriedades físico-químicas no estado sólido.

O produto natural 1,7-dihidroxi-3,8-dimetoxixantona, bastante conhecido por suas propriedades biológicas, foi isolado da família de plantas *Guttiferae*.^[2]



Uma justificativa para a escassez de trabalhos estruturais de xantonas como a 1,7-dihidroxi-3,8-dimetoxixantona está relacionada com a dificuldade de obtenção de cristais de qualidade para a realização de medidas de difração de raios X (DRX) por monocristal. Assim, o objetivo deste trabalho é a obtenção de monocristais de qualidade e, conseqüentemente, realizar a análise das geometrias intra e intermoleculares da 1,7-dihidroxi-3,8-dimetoxixantona.

Resultados e Discussão

Os monocristais de 1,7-dihidroxi-3,8-dimetoxixantona para a análise de DRX foram obtidos, após várias tentativas de re-cristalização em uma série de solventes, em mistura de etanol e metanol 1:1 (v/v). Após a coleta de dados de DRX a estrutura foi determinada por métodos diretos usando SHELXS-97 e o modelo foi refinado usando o programa SHELXL-97 por mínimos quadrados de matriz completa em F².

O composto natural cristalizou em um grupo espacial não centrossimétrico P2₁2₁2₁ com uma molécula na unidade assimétrica (Figura 1). Observam-se que existem duas ligações de hidrogênio intramoleculares que ocorrem entre os átomos O1–H1...O9 e O7–H7...O8.

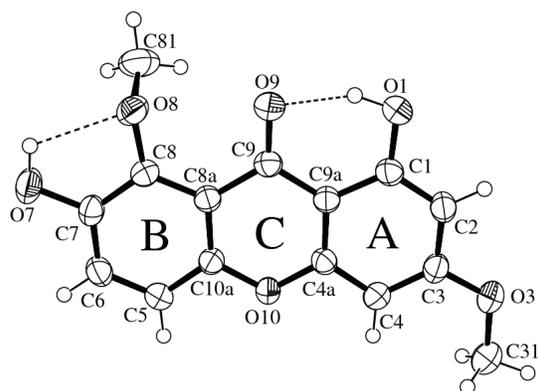


Figura 1. Representação ORTEP da 1,7-dihidroxi-3,8-dimetoxixantona.

Através da análise das geometrias intramoleculares evidenciou-se, como esperado, a planaridade do sistema xantônico, incluindo os 5 oxigênios ligados diretamente aos anéis. Considerando um plano passando por todos os átomos que formam os anéis A, B e C, o desvio quadrático médio encontrado é de 0,0231. Com relação às interações intermoleculares observam-se duas ligações de hidrogênio que apresentam considerável importância para a estabilização do empacotamento cristalino. Uma delas é a interação O7–H7...O7 que forma uma cadeia helicoidal, operada pelo eixo parafuso 2₁, ao longo do eixo *a*, e outra mais fraca que envolve O1–H1...O3 estabilizando a rede cristalina ao longo da direção *b*.

Conclusões

O produto natural 1,7-dihidroxi-3,8-dimetoxixantona foi cristalizado e sua estrutura intra e intermolecular foi determinada por meio de DRX.

Agradecimentos

Ao CNPq, CAPES, FINEP e FAPEMIG.

¹ Suzuki, O.; Katsumata, Y.; Oya, M.; Chari, V. M.; Vermes, B.; Wagner, H.; Hostettmann, K. *Planta Medica*, **1981**, 42(1), 17-21.

² Nagem, T.J. e Da Silveira J.C. *Phytochemistry*, **1989**, 28(8), 2211-2212.