A influência dos grupos amino e hidroxila no arranjo supramolecular de duas trimetoxi-chalconas

Igor Dalarmelino Borges^{1(IC)*}, Vitor Santos Duarte^{2(PG)},
Ricardo Rodrigues Ternavisk^{2(PG)}, Hamilton Barbosa Napolitano^{1,2(PQ)}.

igor_dalarmelino@hotmail.com

¹Centro Universitário de Anápolis (UniEVANGÉLICA), Anápolis, GO, Brasil.

²Universidade Estadual de Goiás, Câmpus Anápolis de Ciências Exatas e Tecnológicas - Henrique Santillo, Anápolis, GO, Brasil.

Palavras-chave: Chalconas, Arranjo Supramolecular, interação N-H...O e O-H...O.

Chalconas são compostos orgânicos que podem ser obtidos pela extração de fontes naturais ou por meio de síntese química¹. Tais compostos são amplamente estudados devido seu potencial de aplicação biológica sendo descritos na literatura como *anti-inflamatório*, *antifúngica*, *antiprotzoários*^{2,3}, *antimalarial*, *antioxidante*, dentre outras⁴. A estrutura base das chalconas possui uma cadeia insaturada de três carbonos que são ligados em suas extremidades a um anel aromático.⁵ Estruturas semelhantes indicam potencialidades à propriedades semelhantes, contudo na presença de diferentes grupos funcionais em estruturas similares podemos ter alterações significantes no arranjo molecular. O entendimento estrutural desses compostos nos auxilia na compreensão do arranjo supramolecular bem como na interpretação das propriedades físicas, químicas e biológicas. A metodologia cristalográfica⁶ descreve os aspectos estruturais e elucida as interações presentes no empacotamento. Para as duas chalconas apresentadas analisamos a influência dos grupos *amino* e *hidroxila* para o arranjo supramolecular. Na chalcona **1** temos parte da planaridade sendo estabilizada por uma interação *intramolecular* do tipo N-H...O e para a chalcona **2** temos como auxílio na planaridade uma interação *intramolecular* do tipo O-H...O, como ilustrado na figura 1.

Figura 1: Representação das interações N-H...O (Chalcona **1**) e O-H...O (Chalcona **2**).

Na chalcona **1**, a interação N-H $\cdots$ O possui os seguintes parâmetros;

d(D-H) Å	d(H $\cdots$ A) Å	d(D $\cdots$ A) Å	d(D-H $\cdots$ A)(°)
1,017	1,844	2,621	130,40

Enquanto que na chalcona **2**, a interação O-H $\cdots$ O possui os parâmetros;

d(D-H) Å	d(H $\cdots$ A) Å	d(D $\cdots$ A) Å	d(D-H $\cdots$ A)(°)
0,944	1,643	2,523	153,40

Notamos que para a interação O-H $\cdots$ O na Chalcona **2** tem-se uma menor distância quando comparada a interação N-H $\cdots$ O da Chalcona **1** e também tem-se um ângulo mais próximo de 180° para a interação O-H $\cdots$ O. A característica de interação mais intensa pode ser avaliada pelos parâmetros geométricos, e as diferenças para o arranjo supramolecular da estrutura podem ser assim analisadas, contribuindo para o entendimento conformacional e interacional da estrutura. . Um estudo sobre a topologia molecular pelos métodos de *Teoria Quântica de Átomos em Moléculas* (QTAIM) será realizada para identificar os níveis energéticos das interações observadas no arranjo supramolecular de ambas chalconas.

Agradecimentos

Os autores agradecem a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro.

Referências

1. Patil, C. B., Mahajan, S. K. & Katti, S. A. Chalcone: A versatile molecule. *J. Pharm. Sci. Res.* **1**, 11–22 (2009).
2. Nowakowska, Z. A review of anti-infective and anti-inflammatory chalcones. *Eur. J. Med. Chem.* **42**, 125–137 (2007).
3. Silva, W. A. *et al.* Biological and structure-activity evaluation of chalcone derivatives against bacteria and fungi. *J. Braz. Chem. Soc.* **24**, 133–144 (2013).
4. Singh, P., Anand, A. & Kumar, V. Recent developments in biological activities of chalcones: A mini review. *Eur. J. Med. Chem.* **85**, 758–777 (2014).
5. Devia, a. C., Ferretti, F. H., Ponce, C. a. & Tomas, F. Conformational equilibrium and intramolecular hydrogen bond of 4 H X and 4X substituted 2 H (OH) chalcones. *Journal of Mol. Struct.* **493**, 187–197 (1999).
6. William B. Fernandes, Hamilton B. Napolitano, C. N. & Lariucci, F. T. M. & C. Aplicações Tecnológicas da Metodologia Cristalográfica. *Rev. Process. químicos* **4**, 19–32 (2010).