

Estrutura cristalina de chalconas contendo N-heterociclos e investigação da supramolecularidade através de superfície de Hirshfeld.

C. M. D. S. Junior ^a, C. M. B. de Azevedo ^a, J. C. Pessôa ^a, A. S. de Souza ^a, S. Pinheiro ^a, M. C. R. Freitas ^b.

Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Brazil.
Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Brazil.

Chalconas pertencem à classe dos compostos flavonoides. Quimicamente caracterizam-se por apresentarem subunidade C6-C3-C6, genericamente C_n, onde n = número de átomos ligados, em que n=3 corresponde a uma cetona, alfa, beta insaturada. Podem ser de origem natural ou sintética. Foram realizados estudos estruturais correlacionando-os com propriedades anticancerígenas, sendo que a substituição do anel C6 por anéis heterocíclicos, uma boa estratégia na busca por agentes anticancerígenos¹. Neste trabalho analisaremos as estruturas de três chalconas sintéticas, cujas unidades assimétricas correspondentes às moléculas apresentam-se na **Figura 1**. Os compostos pertencem ao sistema cristalino, monoclinico (CHALC01 e CHALC02) e ortorrômbico (CHALC10), com grupos espaciais P_c, P₂₁/c e P₂₁2₁2₁ respectivamente, todas com z = 4.

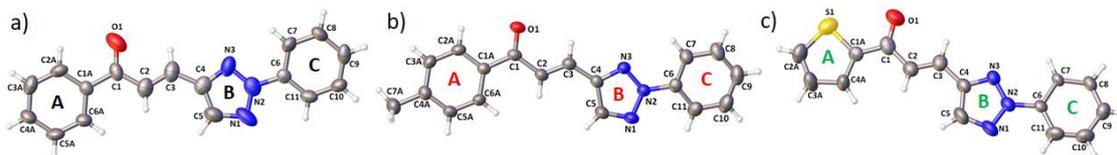


Figura 1: Unidades assimétricas dos compostos a) CHALC01 B) CHALC02 e C) CHALC10.

Pode-se observar da **Figura 1**, que todas as chalconas apresentaram conformação *s-cis*, o que segundo Lawrence e colaboradores, influencia na atividade citotóxica². As distâncias das ligações C-C presente no anel A são na média 1,373(9); 1,385(2) e 1,370(8) Å respectivamente para CHALC01, 02 e 10. Essas distâncias são intermediárias entre ligações simples C-C (1,54Å) e ligações duplas C=C (1,34Å)³, evidenciando o caráter aromático do anel. Mesma tendência de aromaticidade foi observada para os valores das distâncias de ligação nos anéis triazólicos B, 1,336(9); 1,398(2) e 1,353(8) Å e fenil C, 1,372(9); 1,380(3) e 1,373(8) Å. Os anéis aromático A e B conectados pelo grupamento alifático apresentam pequenos ângulos de torção, iguais a 6,2(6), 4,6(1) e 12,0(5)° respectivamente para as chalconas 01, 02 e 10. O pequeno desvio de planaridade pode evidenciar uma leve deslocalização eletrônica entre os anéis. A aromaticidade por sua vez contribui para interações intermoleculares do tipo C-H...π presente nos sólidos, como ilustrado na **Figura 2a)** para CHALC01. Além destas interações, estão presentes ligações de hidrogênio não clássicas, como ilustrado na **Figura 2b)** e **c)** para CHALC02 e 10. Espera-se que a descrição de parâmetros estruturais de um conjunto de chalconas, juntamente com futuros resultados biológicos, possam contribuir para a racionalização de eficientes agentes anticancerígenos desta classe de compostos.

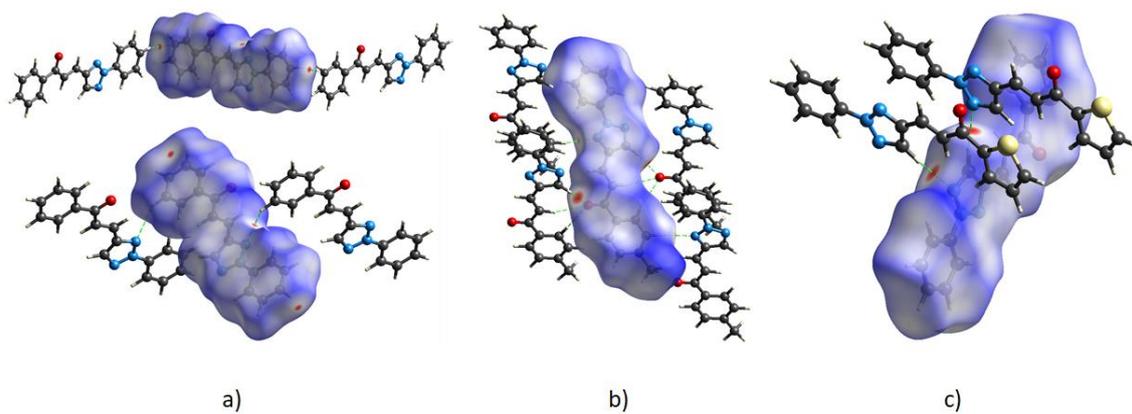


Figura 2: HS em d_{norm} para a) CHALC01 B) CHALC02 e C) CHALC10.

¹Kamal, A.; *at al.*; *Eur. J. Med. Chem.* **2011**, *46*, 3820

²Ducki, S.; *at al.*; *Med. Chem.* **1998**, *8*, 1051.

³*International Tables for Crystallography*, v. C, p. 790–811, **2006**.