

Qual é o Papel da Cristalografia no Emergente Cenário Científico e Tecnológico Mundial?

O conhecimento estrutural de substâncias constitui importante papel no trabalho científico, uma vez que tal elucidação permite a compreensão de propriedades químicas, físicas e biológicas dos compostos. Diversas técnicas são usadas para esse objetivo, porém, visto a necessidade de conhecimento do arranjo tridimensional dos átomos, Almeida et al.¹ citam a Difração de Raios-X por Monocristais, Difração de Nêutrons, Ressonância Magnética Nuclear, Espalhamento de Raios-X a Baixo Ângulo, Microscopia Eletrônica e Modelagem Teórica. Assim, a Difração de Raios-X é a mais adequada, uma vez que possui alta resolução para descrição da densidade eletrônica por meio da obtenção indireta da correspondente imagem².

Devido ao possível conhecimento das propriedades das substâncias, as análises cristalográficas são frequentes em campos de pesquisa, como Ciência de Materiais³, Química Orgânica⁴, Química Ambiental⁵ e Farmacologia⁶. Além dos campos supracitados, a cristalografia se mostra imprescindível na determinação de fármacos obtidos por vias sintéticas e/ou produtos naturais, isto é, os campos da Farmacologia e Farmacognosia⁷.

Mais especificamente na farmacologia, a análise estrutural tem importante papel na descrição de possíveis atividades farmacológicas. Por exemplo, na farmacodinâmica, um fármaco estruturalmente inespecífico depende única e exclusivamente das propriedades físico-químicas da molécula analisada, sendo sua complexação junto a macromoléculas ocorrida predominantemente através de interações de van der Waals, como os anticonvulsivantes. Por outro lado, o reconhecimento molecular de um fármaco

estruturalmente específico na biomacromolécula se dá em função do arranjo tridimensional dos grupamentos funcionais e suas propriedades moleculares, ilustrado pelo modelo ajuste-induzido⁸.

Somado a isso, a cristalografia tem importante papel também na otimização da atividade biológica de fármacos, como os citados anteriormente. Dentre as modificações cristalinas que podem ser responsáveis por essa otimização, destacam-se os cocristais de fármacos por conterem um ingrediente farmacêutico ativo (IFA) e uma molécula sem toxicidade (ou outro IFA), denominado coformador⁹⁻¹¹. Uma vez que a baixa solubilidade de fármacos ainda é uma limitação, os cocristais têm ganhado espaço na literatura pois, mesmo que sem alteração da estrutura molecular, apresentam uma solubilidade até cem vezes maior quando comparado ao fármaco isolado, influenciando em sua biodisponibilidade¹²⁻¹⁴.

Estudos mostram a Microscopia Eletrônica de Transmissão – um tipo de cristalografia – sendo usada na elucidação estrutural de zeólitas e materiais mesoporosos¹⁵⁻¹⁷. Tais materiais têm recebido atenção ultimamente devido ao seu interesse industrial em catálise, separação e troca iônica. Assim como nos fármacos, a caracterização estrutural de materiais porosos é imprescindível para o entendimento e otimização de suas propriedades físico-químicas, assim como para a aplicação no desenvolvimento de novos materiais¹⁸.

Finalmente, todos os exemplos supracitados somados a uma ampla gama de aplicações da metodologia cristalográfica são suficientes para explicar o aumento da produção científica relacionada a tais análises. Isso pode ser

mensurado tanto a partir da ciencimetria quanto a partir do Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC). O CCDC é um banco de dados de estruturas cristalinas com pouco mais de cinquenta anos de criação e que já possui quase 900 mil estruturas depositadas. Concluímos essa breve apresentação destacando que o campo de pesquisa em cristalografia tem futuro promissor uma vez que a International Union Of Crystallography tem unido forças com a UNESCO desde 2014 (o ano internacional da cristalografia) no sentido de encorajar a criação de centros regionais e sub-regionais para o oferecimento de treinamento e experimentação na área, além da criação de um jornal científico de livre acesso, IUCrJ.

Referência

1. L. R. Almeida, J. J. Silva, V. S. Duarte, T. N. S. Santos and H. B. Napolitano, *Rev. Process. Quim.*, **2014**, 8, 75–86.
2. M. V. Kovalchuk, *Crystallogr. Reports*, **2011**, 56, 539–552.
3. L. B. De Paiva, a. R. Morales and F. R. V. Díaz, *Cerâmica*, **2008**, 54, 213–226.
4. M. S. Sader, M. Ferreira and M. L. Dias, *Polímeros*, **2006**, 16, 12–18.
5. D. a. Fungaro, J. C. Izidoro and R. S. Almeida, *Eclat. Quim.*, **2005**, 30, 31–35.
6. M. W. Biavatti, P. C. Vieira, M. F. D. G. F. Da Silva, J. B. Fernandes, S. R. Victor, F. C. Pagnoccab, S. Albuquerque, I. Caracelli and J. Zukerman-Schpector, *J. Braz. Chem. Soc.*, **2002**, 13, 66–70.
7. V. Cortez-gallardo, J. P. Macedo-ceja and G. Arteaga-aureoles, **2004**, 15, 123–136.
8. E. J. Barreiro and C. A. M. Fraga, *Química Medicinal: As bases moleculares da ação dos fármacos*, Artmed Editora, Porto Alegre, 3rd edn., **2015**.
9. A. B. O. Rocha, G. Kuminek, T. C. Machado, J. Rosa, G. S. Rauber, P. A. Borba, S. Siedler, H. K. Stulzer, S. L. Cuffini, N. Rodriguez-Hornedo and S. G. Cardoso, *Quim. Nova*, **2016**, 39, 1112–1125.
10. D. J. Good and N. Rodríguez-Hornedo, *Cryst. Growth Des.*, **2009**, 9, 2252–2264.
11. E. Grothe, H. Meekes, E. Vlieg, J. H. Ter Horst and R. De Gelder, *Cryst. Growth Des.*, **2016**, 16, 3237–3243.
12. D. P. McNamara, S. L. Childs, J. Giordano, A. Iarriccio, J. Cassidy, M. S. Shet, R. Mannion, E. O'Donnell and A. Park, *Pharm. Res.*, **2006**, 23, 1888–1897.
13. M. B. Hickey, M. L. Peterson, L. A. Scoppettuolo, S. L. Morrisette, A. Vetter, H. Guzmán, J. F. Remenar, Z. Zhang, M. D. Tawa and S. Haley, *Eur. J. Pharm. Biopharm.*, **2007**, 67, 112–119.
14. J. F. Remenar, S. L. Morissette, M. L. Peterson, B. Moulton, J. M. MacPhee, H. R. Guzmán and Ö. Almarsson, *J. Am. Chem. Soc.*, **2003**, 125, 8456–8457.
15. A. Taguchi and F. Schüth, *Microporous Mesoporous Mater.*, **2005**, 77, 1–45.
16. X. Zhao, X. Bu, T. Wu, S.-T. Zheng, L. Wang and P. Feng, *Nat. Commun.*, **2013**, 4, 2344.
17. A. Phan, C. J. Doonan, F. J. Uribe-Romo, C. B. Knobler, M. O'Keefe and O. M. Yaghi, *Acc. Chem. Res.*, **2010**, 43, 58–67.
18. J. Sun and X. Zou, *Dalt. Trans.*, **2010**, 39, 8355.

Jean M. F. Custodio^{a*} &
Fernando H. O. Alves^b

^aInstituto de Química, Universidade Federal de Goiás, 75132-400, Goiânia – GO, Brasil

^bCiências Exatas e Tecnológicas, Universidade Estadual de Goiás, 87020-900, Anápolis – GO, Brasil

*e-mail: jeanmfcustodio@gmail.com