

Sumário

<i>Lista de Abreviaturas</i>	I
<i>Lista de Tabelas</i>	II
<i>Lista de figuras</i>	V
<i>Resumo</i>	VII
<i>Abstract</i>	VIII

Capítulo 1

<i>1.1 – Objetivos</i>	02
<i>1.2 – Química e Cristalografia</i>	02
<i>1.3 – Tema Central</i>	03
<i>1.4 – O Problema</i>	04
<i>1.5 – As Quinonas</i>	06
<i>1.5.1 – Introdução</i>	06
<i>1.5.2 – Classificação das Quinonas</i>	07
<i>1.5.3 – Reações Típicas das Quinonas</i>	10
<i>1.6 – Quinonas e sua Atividade Biológica</i>	12

Capítulo 2

<i>2.1 – Histórico</i>	14
<i>2.2 – Definição da Doença</i>	14
<i>2.3 – Transmissores</i>	15
<i>2.4 – Forma da Infecção</i>	15
<i>2.5 – Mecanismos de transmissão</i>	16
<i>2.5.1 – Transmissão pelo Vetor</i>	16
<i>2.5.2 – Transfusão Sangüínea</i>	17
<i>2.5.3 – Outros Tipos de Transmissão</i>	18
<i>2.6 – Formas da Doença e Sintomas</i>	18
<i>2.7 – Controle da Doença</i>	19
<i>2.8 – As enzimas</i>	21
<i>2.8.1 - Glutathiona reductase (GR)</i>	21
<i>2.8.2 - Tripanotiona reductase (TR)</i>	23
<i>2.8.3 - Inibidores</i>	24

Capítulo 03

3.1 – Parte experimental.....	26
3.1.1 – Obtenção dos Monocristais.....	26
3.1.2 – Coleta e Redução dos Dados Experimentais.....	26
3.2 - 4a,6a,8a-Tricloro-7-metoxi-1,4,4a,8a-tetrahidro-1,4-metano-naftaleno-5,8-diona (AC2).....	29
3.2.1 – Resultados Cristalográficos.....	30
3.2.2 – Análise dos Resultados.....	33
3.3 - 6-aziridi-1-il-4a,7,8a- Tricloro-1,4,4a,8a-tetrahidro-1,4-metano-naftaleno-5,8-diona (AC4)	34
3.3.1 – Resultados Cristalográficos.....	35
3.3.2 – Análise dos Resultados.....	38
3.4 - 4a,8a,-Dicloro-6,7-bis-metilsulfanil-1,4,4a,8a-tetrahidro-1,4-metano-naftaleno-5,8-diona (AC7)	39
3.4.1 – Resultados Cristalográficos.....	40
3.4.2 – Análise dos Resultados.....	43
3.5 - 4a,8a-Dicloro-6-etilsulfanil-7-(metiletil-fenil-amino)-1,4,4a,8a-tetrahidro-1,4-metano-naftaleno-5,8,-diona (AC8)	44
3.5.1 – Resultados Cristalográficos.....	45
3.5.2 – Análise dos Resultados.....	49
3.6 - 4a-Benzenosulfonil-6,7-bis-metilsulfanil-1,4,4a,8a-tetrahidro-1,4-metano-naftaleno-5,8-diona (AC3)	51
3.6.1 – Resultados Cristalográficos.....	52
3.6.2 – Análise dos Resultados.....	56
3.7 - 4a,7-Bis-etilsulfanil-6-fenilamino-1,4,4a,8a,tetrahidro-1,4-metano-naftaleno-5,8-diona (AC5)	57
3.7.1 – Resultados Cristalográficos.....	58
3.7.2 – Análise dos Resultados.....	62
3.8 - 6,7-Bis-fenilsulfanil-1,4-dihidro-1,4-metano-naftaleno-5,8-diona (AC1)	64
3.8.1 – Resultados Cristalográficos.....	65
3.8.2 – Análise dos Resultados.....	69
3.9 - 6,7-Bis-metilsulfanil-1,4-dihidro-1,4-metano-naftaleno-5,8-diol (AC6)	71
3.9.1 – Resultados Cristalográficos.....	72

3.9.2 – <i>Análise dos Resultados</i>	75
3.10 – <i>Análise Comparativa das Estruturas</i>	76
3.10.1 – <i>Grupo 01</i>	76
3.10.2 – <i>Grupo 02</i>	77
3.10.3 – <i>Grupo 3 e 4</i>	78
3.11 – <i>Arranjos Supramoleculares</i>	79
3.11.1 - <i>Introdução</i>	79
3.11.2 – <i>A química Supramolecular</i>	80
3.11.3 – <i>Ligações de Hidrogênio</i>	81
3.11.4 – <i>Ligações de Hidrogênio para os Compostos estudados</i>	82
3.11.4.1 – <i>Grupo 01</i>	82
3.11.4.2 – <i>Grupo 02</i>	93
3.11.4.3 – <i>Grupo 03</i>	99
3.11.4.4 – <i>Grupo 04</i>	101

Capítulo 04

4.1 - <i>Docking</i>	107
4.2 – <i>Estudo de Docking na Tripanotona Redutase (TR)</i>	109
4.2.1 – <i>Sítio Ativo (AS)</i>	110
4.2.2 – <i>Sítio do grupo NADPH (NS)</i>	110
4.2.3 – <i>Sítio de interfaces dos monômeros (IS)</i>	110
4.3 – <i>Critérios de Seleção dos Compostos</i>	111
4.4 - <i>Resultados</i>	111
4.4.1 – <i>Grupo 1</i>	111
4.4.2 – <i>Grupo 2</i>	116
4.4.3 – <i>Grupo 3</i>	119
4.4.4. – <i>Grupo 4</i>	121
4.5 - <i>Conclusões</i>	123

Capítulo 05

5.1 – <i>Conclusão</i>	125
5.2. – <i>Referências Bibliográficas</i>	128