

# CRISTALOGRAFIA: UMA CIÊNCIA MULTIDISCIPLINAR

*Iris L. Torriani*

O ano de 2014 foi instituído como o Ano Internacional da Cristalografia pela Organização das Nações Unidas para a Educação, a Ciência e a Cultura (Unesco). Esse reconhecimento foi baseado na importância dessa ciência multidisciplinar que serviu de base para um grande número de descobrimentos científicos fundamentais, 29 deles merecedores de prêmios Nobel. Surge a pergunta: qual é o domínio da cristalografia e porquê ela permeia tantas ciências básicas como a matemática, a geologia, a química, a física, a biologia, e muitas ciências aplicadas relacionadas com a engenharia, ciência dos materiais e a medicina?

Em 1895 Wilhelm Röntgen descobriu os raios X, os quais imediatamente mostraram ser uma excelente ferramenta nos diagnósticos médicos. Mas levaria mais de uma década para que a radiação X e sua interação com átomos e moléculas fossem estudados pelos físicos e levassem à elucidação da estrutura de materiais orgânicos e inorgânicos. Em 1912, Max von Laue provou que um cristal atravessado por um feixe colimado de raios X provocava efeitos de difração. A imagem captada numa

placa de filme perpendicular à direção de incidência revelava a simetria e a perfeição de uma rede cristalina. Essa experiência abriu caminho para o uso dos raios X como ferramenta fundamental no estudo dos materiais, e mereceu o prêmio Nobel de Física de 1914.

Captar a informação sobre a estrutura da matéria a nível atômico foi então a tarefa que coube à comunidade científica durante o século passado. E assim foram se sucedendo os descobrimentos. Em 1915, William Henry e William Lawrence Bragg ganharam o prêmio Nobel de Física pela determinação das primeiras estruturas cristalinas. Seguidamente, foram os prêmios Nobel de Charles Glover Barkla (Física, 1917), Karl Manne Georg Siegbahn (Física, 1924), Arthur Holly Compton (Física, 1927), os quais se adentraram na natureza da radiação X e mostraram novos caminhos para os estudos da matéria condensada.

Petrus (Peter) Josephus Wilhelmus Debye (Química, 1936), Max F. Perutz e John C. Kendrew (Química, 1962), e nesse mesmo ano James D. Watson, Francis H.C. Crick e Maurice H.F. Wilkins (Fisiologia ou Medicina, 1962) mostraram as enormes possibilidades do estudo das estruturas desordenadas e da

matéria orgânica. Essa última distinção outorgada aos investigadores Watson, Crick e Wilkins foi baseada em experiências de difração de raios X por DNA realizadas por Rosalind Franklin. Esta é considerada uma das maiores descobertas do século XX por “ter aberto as mais espetaculares possibilidades de desvendar os detalhes do controle e transferência da informação genética” como reza a outorga desse prêmio Nobel.

A nova ciência baseada na cristalografia de raios X continuou crescendo e o mundo viu a possibilidade de sintetizar princípios ativos de medicamentos essenciais, como a vitamina B<sub>12</sub>, a penicilina e a insulina, a partir da contribuição de cristalógrafos excepcionais, como Dorothy Crowfoot Hodgkin, que resolveu essas estruturas e 50 anos atrás ganhou o prêmio Nobel de Química, por ter desenvolvido métodos de análise capazes de determinar a estrutura atômica de macromoléculas de importância biológica. Dorothy Hodgkin fez um comentário famoso sobre os resultados de sua estrutura da insulina em 1935: “ver o primeiro diagrama de raios X obtido com cristais de insulina foi um dos momentos mais emocionantes da minha vida. Mas a emoção foi muito

maior em 1969 quando vimos a estrutura da insulina totalmente resolvida, mostrando o mapa de densidade eletrônica” (x). Até hoje, as conquistas alcançadas pela cristalografia e os métodos científicos que acompanham seu desenvolvimento nos surpreendem com novas conquistas fundamentais. Um marco nas descobertas dentro das ciências biológicas foi a determinação da estrutura do complexo molecular que compõem os ribossomos. De importância fundamental na síntese proteica, eles são formados por subunidades independentes, de diferentes tamanhos, difíceis de isolar e formar cristais para realizar experiências de cristalografia de raios X. Uma tarefa considerada quase impossível. O desafio foi vencido pelos ganhadores do prêmio Nobel de Química de 2009: V. Ramakrishnan, Thomas A. Steitz e Ada Yonah. Estações experimentais instaladas em grandes laboratórios de luz síncrotron, nos quais os raios X são produzidos por um anel acelerador de elétrons, permitem obter imagens instantâneas em experiências *in situ*, que detectam a estrutura das moléculas sob mudanças durante processos funcionais. Isto permite a realização de pesquisas inéditas, e já podem ser encarados os desafios do futuro: entender o funcionamento de mecanismos biológicos fundamentais. “Ver” uma fibra muscular em ação? Ou a oxigenação de uma molécula de hemoglobina? Esses processos podem ser observados e monitorados através das mudanças estruturais das macromoléculas envolvidas nessas funções. Um marco nas descobertas dentro das ciências biológicas foi a determinação

da estrutura do complexo molecular que compõem os ribossomos. De importância fundamental na síntese proteica, eles são formados por subunidades independentes, de diferentes tamanhos, difíceis de isolar, formar cristais ou realizar experiências de cristalografia de raios X. O desafio foi vencido pelos ganhadores do prêmio Nobel de Química de 2009: V. Ramakrishnan, Thomas Steitz e Ada Yonah. A União Internacional de Cristalografia (IUCr), vem acompanhando os grupos de pesquisadores de todo o mundo, desde sua fundação em 1948, e tem sido muito importante para o desenvolvimento da cristalografia como ciência básica e multidisciplinar. Existem grupos de pesquisa em cristalografia em mais de 80 países, dos quais aproximadamente 50 são membros efetivos dessa instituição. Desde o início, a IUCr tem promovido o acesso à informação e a cooperação internacional, edita vários jornais indexados e organiza congressos internacionais. O Ano Internacional da Cristalografia está sendo organizado pela IUCr conjuntamente com a Unesco. Desde 1951 o Brasil é membro da IUCr, e os pesquisadores brasileiros têm participado das atividades dessa entidade. A Associação Brasileira de Cristalografia, fundada em 1971, agrupa os cristalógrafos brasileiros, e compartilha o desenvolvimento da área com países de América Latina e com a maioria dos países do mundo. Na comemoração do Ano Internacional da Cristalografia, estamos todos empenhados em mostrar o papel fundamental dessa ciência no desenvolvimento industrial, e promover a conscientização do público sobre a importância da cris-

talografia no estudo dos materiais e nas aplicações em todas as ciências. Essas ideias serão o foco de um encontro de cúpula que terá lugar em setembro de 2014 no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS/CNPEM), que reunirá participantes da América Latina para discutir os avanços que a região pode alcançar nas próximas décadas. A escolha do LNLS como local desse evento não é fortuito. Desde 1997 funciona nessa instituição a única fonte de luz síncrotron da América do Sul. Até hoje, as instalações experimentais desse laboratório foram fundamentais para a realização de trabalhos científicos de alto nível, comparáveis aos realizados em laboratórios no exterior. A cristalografia brasileira viu-se muito favorecida com o uso das linhas de luz do LNLS dedicadas a raios X, para realização de projetos nas áreas de física, química, engenharia de materiais e biologia. E o futuro é promissor: uma nova máquina está sendo construída com perspectivas de começar a funcionar em 2015/16. O desafio será formar mais pesquisadores em todas as áreas da cristalografia. Porque esta ciência vai continuar a ser a que captura a imaginação e guia os passos dos que estudam a estrutura da matéria em todas as formas em que a natureza se apresenta.

*Iris L. Torriani é professora associada do Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas (Unicamp), pesquisadora colaboradora do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron. Foi presidente de Associação Brasileira de Cristalografia, vice-presidente do conselho executivo da União Internacional de Cristalografia e coordena as atividades no Brasil relativas ao Ano Internacional da Cristalografia.*