

10. VOGEL, A. et al., *Análise Inorgânica Quantitativa*, 125-135, IV Ed., Guanabara Dois, Rio de Janeiro, (1981).
11. YALLOUZ A. V., *Instruções de Uso CVAAS Home-Made CETEM-CNPq*, (em edição), (1993).

PAINEL 7

Odor e Estrutura Molecular

Rosângela M. de Araújo

Bolsista de Inic. Científica, Eng. Química,
UFRJ

Paulo Sérgio da S. Pinto

Orientador, Engº Químico, Ph.D.

1. INTRODUÇÃO

Desde o princípio do século passado, a correlação estrutura molecular-odor é um grande mistério para os cientistas. O odor é uma percepção química mais conhecida nos seres vivos, mas pouco compreendida. Os pesquisadores estudam características estruturais, propriedades físico-químicas e de respostas psicofísicas, e procuram correlacioná-las com as respectivas respostas olfativas. Por essa razão, o olfato tornou-se um campo rico para especulações e é constatado, por dados de literatura, que um maior número de teorias foi proposto do que para outra função sensorial.

Ainda não houve elucidação desse mistério de teoria do odor em correlação com a estrutura molecular de substâncias odoríferas, e este esclarecimento é de grande importância, uma vez que permite avanços tanto na área química como bioquímica. Prever o odor de substâncias químicas antes de serem sintetizadas ou isoladas, e reproduzir um dado odor complexo com uma facilidade bem maior do que aquela atualmente empregada, são exemplos do desenvolvimento que se pode alcançar na área química. No setor bioquímico, além da identificação dos receptores olfativos humanos, e do entendimento do seu mecanismo de ação, há descobertas recentes de que certos tipos de odores podem interferir sobre o sistema nervoso dos seres humanos, como, por exemplo, fragâncias de pinho alertam sentidos humanos e misturas cítricas são refrescantes.

Ao mesmo tempo, o grande avanço da computação e incessante desenvolvimento de *softwares* cada vez mais completos e abrangentes, fez com que essa área se tornasse essencial para o estudo da correlação estrutura molecular-odor, e com esta importante ferramenta tornar-se-á possível o esclarecimento desse mistério.

2. MOLÉCULAS ESTUDADAS

As moléculas em análise são diversas, e variam desde cadeias parafínicas até aromáticos conjugados, como se pode observar nos exemplos citados abaixo.

Incluem-se nessas moléculas pares enantioméricos que produzem odores distintos, e isto mostra a importância do conhecimento da conformação da molécula, o que pode ser explicado pela quiralidade das proteínas (receptores olfativos) que podem interagir de forma distinta com as duas formas enantioméricas de uma molécula quiral odorífera, originando, assim, uma diferença de impressão de odor. Entretanto, não devemos esquecer que diversos pares quirais apresentam odores bastante similares, o que não invalida a suposição de receptores

protéicos, pois a forma da molécula como "sentida" pelo receptor pode não depender somente da sua estrutura, com também da conformação no momento de contato e da "atitude" com a qual a molécula se apresenta ao receptor.

Exemplos de moléculas estudadas:

- | | |
|----------------------|----------------|
| • 2-undecanona | maltol |
| • β -ionona | furaneol |
| • dicetona | p-mentano |
| • 7-hidróxi-b-ionona | d e l-carvona |
| • vanilina | isopulegol |
| • isovanilina | neo-isopulegol |