

ESTUDO ESTRUTURAL E TÉRMICO DO POLIMORFISMO DA CITOSINA

Raychimam Douglas Santana Bezerra, rds.bezerra@discente.ufma.br¹,
Liandra de Lima Almirante¹,
Paulo Roberto da Silva Ribeiro¹.

1. Núcleo Pesquisas em Ciências Farmacêuticas e Química Analítica Aplicada (NUPFARQ), Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais (PPGCM) – Centro de Ciências Sociais, Saúde e Tecnologia (CCSST), Universidade Federal do Maranhão (UFMA), Imperatriz, MA, Brasil, CEP: 65.900-410.

RESUMO

INTRODUÇÃO: A Citosina (CIT) é uma pirimidina nucleobase (base nitrogenada) que constitui o RNA e do DNA, responsável por armazenar e transportar informações genéticas nas células. A CIT apresenta polimorfismo estrutural, pois ela pode ser encontrada nas formas *Ia* e *Ib*, além de um solvato na Forma monohidratada, sendo esta forma é a mais estável em condições ambientais. **OBJETIVO:** Realizar o estudo estrutural e térmico do polimorfismo da CIT, utilizando a evaporação lenta do solvente (ELS). **MATERIAIS E MÉTODOS:** Para tanto, a CIT base livre cristalina (CIT_{BLC}), marca *Sigma-Aldrich*, com pureza $\geq 99,0\%$, foi recristalizada (CIT_{REC}) por ELS, utilizando o metanol, à 35 ± 1 °C por quatro dias. Em seguida, as amostras foram caracterizadas por Difractometria de Raios X pelo Método do Pó (DRXP) e por Calorimetria Exploratória Diferencial (DSC). **RESULTADOS:** Os resultados obtidos por DRXP mostraram que a CIT_{BLC} se apresentou na Forma monohidratada que apresenta sistema cristalino monoclinico, com grupo espacial P21/c. Seus parâmetros de rede são: $a = 7,801(5)$ Å, $b = 9,844(7)$ Å, $c = 3,815(6)$ Å, com ângulo $\beta(^{\circ}) = 99,70$. Enquanto a CIT_{REC} apresentou-se nas Formas monohidrata (46,76%) e na Forma *Ia* (53,23%), que possui sistema cristalino ortorrômbico, com grupo espacial P2₁2₁2₁, e parâmetros de rede $a = 13,041(2)$ Å, $b = 9,494(1)$ Å, $c = 7,683(1)$ Å, com ângulos $\alpha = \beta = \gamma = 90,00^{\circ}$. A curva de DSC da CIT_{BLC} mostrou dois eventos térmicos de caráter endotérmico ocorrendo nas temperaturas de 50,32 e 310,87 °C, atribuídos respectivamente a desidratação e a fusão deste composto. A análise por DSC da CIT_{REC} evidenciou o evento de desidratação em torno de 52,49 °C e fusão em 308,08 °C. **CONCLUSÃO:** Assim, este estudo mostrou que a metodologia por ELS resultou na conversão parcial da CIT para a sua Forma *Ia*.

Dessa forma, os resultados obtidos neste trabalho foram muito úteis para compreender o comportamento estrutural deste composto em meio orgânico.

Descritores: Citosina, Polimorfismo; Caracterização Estrutural; Caracterização Térmica.