

Obtenção e estudo cristalográfico de novas formas cristalinas derivadas de citosina

ANASTASSIA VIATCHESLAVOVNA PRIIMENKO (Autor), RODRIGO DE SOUZA CORREA (DEQUI) (Orientador)

A citosina é uma das bases nitrogenadas essenciais para a estrutura e a replicação do DNA, tendo, portanto, um grande interesse biológico. Este trabalho procura estudar o comportamento e as propriedades estruturais da citosina no estado sólido, tendo como objetivo obter e caracterizar novos constituintes multicomponentes contendo a citosina, comparando os dados obtidos com a molécula de citosina pura e outros análogos. No presente trabalho, uma nova forma cristalina contendo citosina protonada e trifluoroacetato foi obtida e caracterizada por difração de raios X em monocristais e espectroscopia na região do infravermelho. Analisando as bandas do espectro de infravermelho do sólido, foram observadas bandas na região de alta energia (3390 e 3103 cm^{-1}) referentes aos estiramentos assimétricos e simétricos do grupo NH_2 , além de outras bandas ($\nu_{\text{N-H}}$, $\nu_{\text{C-H}}$) características de citosina que foram atribuídas em comparação com a molécula de citosina pura, presentes na região de 3000-2700 cm^{-1} . Observou-se que em 1693 cm^{-1} está presente a banda de estiramento C=O na nova forma cristalina, enquanto na molécula de citosina livre, esta banda $\nu_{\text{C=O}}$ ocorre na região de 1666 cm^{-1} , mostrando que a protonação da molécula de citosina contribuiu para aumentar o caráter de dupla ligação C=O . Este aspecto também pode ser confirmado pela distância de ligação C=O no trifluoroacetato de citosinium e citosina pura que apresentam valores de 1,215 Å e 1,235 Å, respectivamente. Em adição, uma banda intensa em 1189 cm^{-1} foi atribuída ao estiramento C-F , indicando a presença do contra-íon trifluoroacetato. Portanto, uma nova forma cristalina contendo citosina e trifluoroacetato foi obtida, caracterizada e comparada com a molécula de citosina pura. Esta forma multicomponente apresenta um comportamento estrutural diferente quando comparada com citosina pura e de outros análogos halogenados. Novos derivados estão sendo obtidos para comparações e melhor entender o comportamento da molécula de citosina.

Instituição de Ensino: Universidade Federal de Ouro Preto