

## **Estudo estrutural de formas sólidas multicomponentes contendo a Vitamina B10 (PABA)**

ARTHUR MARQUES DO NASCIMENTO (Autor), Rodrigo de Souza Correa (Orientador)

O ácido p-aminobenzóico (PABA), possui propriedade antioxidante e pode combater algumas bactérias, tendo então, grande interesse biológico. Sua molécula apresenta uma versatilidade interessante, já que ela pode atuar tanto como doadora quanto receptora de prótons possibilitando a formação de sais ou cocrystalais estáveis mantidos por ligações de hidrogênio. Sendo assim, neste trabalho, foram obtidas e caracterizadas duas novas formas cristalinas, nas quais uma delas apresenta o PABA em sua forma desprotonada (PABA com 2,2' - dipiridilamina - Forma 1) e a outra, apresenta o PABA em sua forma protonada (PABA com ácido pícrico - Forma 2). Essas formas obtidas confirmam a versatilidade da molécula em estudo. As amostras foram caracterizadas por meio de análises de difração de raios X por monocristal e espectroscopia na região do infravermelho, permitindo explorar o comportamento estrutural das novas formas cristalinas derivadas de PABA obtidas. Observando o espectro da forma 1, nota-se que existe um ombro que pode ser associado ao estiramento N-H em 3320 cm<sup>-1</sup> e outra banda em 3180 cm<sup>-1</sup> que pode ser atribuída ao estiramento do nitrogênio protonado N-H da molécula de 2,2' -dipiridilamina, o que induz à observação de que o PABA protonou a molécula de 2,2' -dipiridilamina, portanto, nesta forma cristalina o PABA encontra-se desprotonado. Por outro lado, na estrutura contendo PABA e ácido pícrico, nota-se a presença do picrato pelos estiramentos característicos do grupo NO<sub>2</sub> ocorrendo em torno de 1390-1300 cm<sup>-1</sup>, e nesta estrutura a molécula de PABA encontra-se protonada. Estes aspectos foram confirmados por dados de difração de raios X por monocristal e enfatiza a versatilidade estrutural da molécula de PABA. A análise do “fingerprint plot” (impressão digital dos contatos intermoleculares), também revela que houve a formação das novas formas multicomponentes, que contribuíram para aumentar a quantidade de ligações de hidrogênio no sistema, resultando em estruturas mais estáveis.

Instituição de Ensino: Universidade Federal de Ouro Preto