

Caracterização de fármacos policristalinos com o uso da difração de raios X

F. F. Ferreira^a, S. A. Gutierrez^b, P. C. P. Rosa^c, C. O. Paiva-Santos^b.

^aLaboratório Nacional de Luz Síncrotron, Campinas, SP, Brasil.

^bDept. Físico-Química, Instituto de Química, UNESP, Araraquara, SP, Brasil.

^cDept. Química Analítica, Instituto de Química, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil.

A difração de raios X por policristais (DRXP) é um dos métodos mais empregados na caracterização de materiais e é rotineiramente utilizada na identificação de fases cristalinas. Uma grande quantidade de fármacos policristalinos pode ser simultaneamente identificada e a quantificação de tais polimorfos pode ser obtida pelo método de Rietveld [1] de refinamento de estruturas cristalinas. Polimorfos podem ser definidos como diferentes formas cristalinas de um composto com mesma estrutura química primária. O uso de fontes de luz síncrotron para a realização de experimentos de DRXP aumenta de maneira significativa a quantidade de informação estrutural obtida, quando comparada com fontes convencionais, devido à sua alta intensidade e à alta colimação dos feixes de raios X, bem como a uma maior resolução angular instrumental.

Neste trabalho serão discutidos diversos resultados obtidos com o uso de dados de difração de raios X de alta resolução, obtidos na Linha de Difração de Raios X por Policristais (D10B-XPB) [2], do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS, Campinas, SP), fazendo-se uma correlação com resultados obtidos em difratômetro convencional, mostrando que a alta resolução instrumental é de grande importância para a correta caracterização/quantificação de fases policristalinas de fármacos.

Em particular, a estrutura cristalina do polimorfo A do mebendazol, um anti-helmíntico usado no tratamento de infestações por diversos vermes, que foi recentemente determinada por nosso grupo, será discutida. A partir do conhecimento desta estrutura cristalina agora se torna possível quantificar frações de fase desta forma, que é a mais estável à temperatura ambiente, porém a que apresenta características de placebo, em medicamentos contendo a forma C, a mais recomendada para o tratamento das doenças.

[1] Rietveld, H. M. *J. Appl. Cryst.*, **2**(2), 65-71 (1969).

[2] Ferreira, F. F., Granado, E., Carvalho Jr., W., Kycia, S. W., Bruno, D., Droppa Jr., R. J. *Synchrotron Radiat.*, **13**(1), 46-53 (2006).

Agradecimentos: Os autores gostariam de agradecer o LNLS pelo tempo de luz e ao CNPq e FAPESP pelo auxílio financeiro.