

Resumo do Trabalho em português:



AVALIAÇÃO DO COMPORTAMENTO TÉRMICO DO ANTIDEPRESSIVO OXALATO DE ESCITALOPRAM

Bárbara V. Pinto, Ana Paula G. Ferreira, Éder Tadeu G. Cavalheiro*
Instituto de Química de São Carlos – Universidade de São Paulo / IQSC-USP
*cavalheiro@iqsc.usp.br

Objetivos

Estudar o comportamento térmico do antidepressivo oxalato de escitalopram, isômero S [1], por TG/DTG-DTA, DSC e TG-FTIR e propor um mecanismo para descrever o comportamento térmico do fármaco.

Métodos e Procedimentos

As curvas de TG/DTA foram obtidas em um módulo simultâneo SDT Q600 TA Instruments, em atmosfera dinâmica de ar ou nitrogênio, vazão de 50 mL min⁻¹, razão de aquecimento de 10 °C min⁻¹, T_{amb} a 1000°C e suportes de amostra abertos de α -alumina com m = 7,0 \pm 0,1 mg. As curvas DSC foram obtidas em um módulo calorimétrico DSC Q10 TA Instruments, em atmosfera dinâmica de nitrogênio, vazão de 50 mL min⁻¹, razão de aquecimento de 10°C min⁻¹, de -60°C a 200°C, utilizando suporte de amostra em alumínio com orifício central na tampa (ϕ = 0,7 mm) e m = 5,0 \pm 0,1 mg.

Resultados

As curvas TG/DTG e DTA sugerem que a amostra é termicamente estável até cerca de 165°C em ambas as atmosferas. A decomposição ocorre, em ambos os casos, em duas etapas com resíduo final de 2,23 e 1,15% em nitrogênio e ar, respectivamente. A primeira perda de massa entre 165,6 -236,2°C se refere à decomposição do íon oxalato com a liberação do ácido cianídrico (calc = 27,5%; exp = 27,2%), segundo cálculos estequiométricos. Em seguida ocorre a decomposição do restante da molécula entre 236,2-355,2°C com perda de massa de 70,2%.

Já na curva DSC foi possível observar um pico endotérmico em 153,3°C, referente à fusão no primeiro ciclo de aquecimento. A amostra não apresenta cristalização durante o resfriamento. Após a fusão, tanto nos ciclos de resfriamento quanto de aquecimento, foram observadas apenas transições de 2º ordem, típicas de material amorfo.

Os gases evoluídos durante a degradação térmica do escitalopram foram investigados por TG-FTIR. Os resultados apontam para a liberação de ácido fórmico, CO₂ e CO provenientes da decomposição do contra íon oxalato, o que concorda com o proposto por Hotová *et al.* [2] para o ácido oxálico. Foram ainda observados sinais de HC≡N e dimetilamina.

Conclusões

Assim, conclui-se que o oxalato de escitalopram funde em 153,3°C sem recristalizar durante o resfriamento. Em seguida ocorre a decomposição do contra-íon oxalato com liberação de ácido fórmico, monóxido e dióxido de carbono, além do ácido cianídrico, da decomposição da molécula em um primeiro evento de decomposição térmica. Na segunda etapa foi identificada a liberação de dimetilamina.

Referências Bibliográficas

- [1] Jagtap, A., Bhaskar, M. Evaluation of Antidepressant and Antinociceptive Activity of Escitalopram. *Indian Journal of Pharmaceutical Education and Research*. v.47. p.97, 2013.
- [2] Hotová, G., Slovák, V. Quantitative TG-MS analysis of evolved gases during the thermal decomposition of carbon containing solids. *Thermochimica Acta*. v. 632, p. 23-28, 2016.