

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  $50 \text{ mL min}^{-1}$ , razão de aquecimento de  $10 \text{ }^{\circ}\text{C min}^{-1}$ ,  $T_{\text{amb}}$  a  $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$  e suportes de amostra abertos de  $\alpha$ -alumina com  $m = 7,0 \pm 0,1 \text{ mg}$ . As curvas DSC foram obtidas em um módulo calorimétrico DSC Q10 TA Instruments, em atmosfera dinâmica de nitrogênio, vazão de  $50 \text{ mL min}^{-1}$ , razão de aquecimento de  $10\text{ }^{\circ}\text{C min}^{-1}$ , de  $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$  a  $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ , utilizando suporte de amostra em alumínio com orifício central na tampa ( $\phi = 0,7 \text{ mm}$ ) e  $m = 5,0 \pm 0,1 \text{ mg}$ .

### Resultados

As curvas TG/DTG e DTA sugerem que a amostra é termicamente estável até cerca de  $165\text{ }^{\circ}\text{C}$  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  $165,6$  - $236,2\text{ }^{\circ}\text{C}$  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  $236,2$ - $355,2\text{ }^{\circ}\text{C}$  com perda de massa de 70,2%.

Já na curva DSC foi possível observar um pico endotérmico em  $153,3\text{ }^{\circ}\text{C}$ , 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 amorfó.

Os gases evolvidos durante a degradação térmica do escitalopram foram investigados por TG-FTIR. Os resultados apontam para a liberação de ácido fórmico,  $\text{CO}_2$  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  $\text{HC}\equiv\text{N}$  e dimetilamina.

### Conclusões

Assim, conclui-se que o oxalato de escitalopram funde em  $153,3\text{ }^{\circ}\text{C}$  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.