

Uso de calorimetria isotérmica na avaliação cinética da interação de Pirimetamina com quitosana quimicamente modificada.

Elaine C. N. Lopes (PG)*, Eunice F. S. Vieira (PQ) e Antonio R. Cestari (PQ).

Laboratório de Materiais e Calorimetria, Departamento de Química, Universidade Federal de Sergipe, CEP: 49000-000, São Cristóvão – SE, *E-mail: elainelopes78@gmail.com

Palavras Chave: Quitosana quimicamente modificada, cinética de adsorção, calorimetria isotérmica.

Introdução

A calorimetria isotérmica tem sido um vantajoso método para a obtenção de dados cinéticos, termoquímicos e de avaliações mecanísticas na interface sólido/solução, principalmente por não necessitar de investigações analíticas adicionais¹. Neste trabalho, empregou-se a técnica de quebra de membrana^{1,2}, para avaliar a cinética da interação da pirimetamina (droga antifolato utilizada no tratamento da toxoplasmose) com beads de quitosana quimicamente modificada.

Dados de energias resultantes de interação, Q_{es} , foram obtidos nas temperaturas de 25 e 35 °C, utilizando-se soluções aquosas de pirimetamina $5,0 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$, em solução tampão pH 7,0. As medidas foram realizadas em um calorímetro C80, tipo Calvet (SETARAM). Os dados calorimétricos foram analisados segundo os modelos cinéticos de difusão intrapartícula e de Avrami, o qual foi utilizado com sucesso em trabalhos anteriores^{3,4}.

Resultados e Discussão

Beads de quitosana reticulada com glutaraldeído (Quit-GLT), beads de quitosana modificada com vanilina (Quit-VAN) e Quit-GLT contendo cobre (II) adsorvido (Quit-Cu) foram preparados e caracterizados por Análise Termogravimétrica e Espectroscopia de Absorção na Região do Infravermelho.

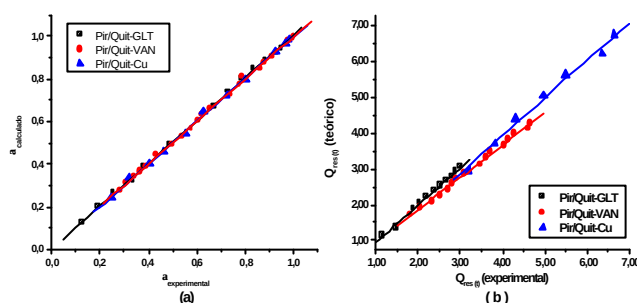
Os valores obtidos de Q_{res} (J g^{-1}) referentes às interações Pir/Quit-GLT, Pir/Quit-VAN e Pir/Quit-Cu foram: 3,047, 4,698, 6,872, a 25°C e 1,639, 3,370, 9,861, a 35°C, respectivamente. Os dados calorimétricos indicaram, ainda que a interação da droga com o material Quit-Cu apresentou o menor tempo de reação (tabela 1) em relação aos demais materiais utilizados.

Tabela 1: Parâmetros cinéticos das interações segundo o modelo cinético de Avrami.

Interação	Temp. (°C)	$k_a/10^{-2}$ (min^{-1})	Tempo de Reação
Pir/Quit-GLT	25	2,42 - 4,41	48 min
	35	5,98 - 4,97	
Pir/Quit-VAN	25	0,76 - 2,70	69 min

	35	1,63 - 2,85	
Pir/Quit-Cu	25	3,53 - 5,90	39 min
	35	2,31 - 6,39	

Os dados experimentais ajustaram-se ao modelo cinético de Avrami e ao modelo de difusão intrapartícula (Figura 1). A partir do modelo de Avrami obtiveram-se as constantes cinéticas, k_{av} (tabela 1)



que estão relacionadas com a velocidade da reação, e a constante n , que pode estar relacionada às mudanças no mecanismo de interação da droga com os materiais.

Fig. 2: Confrontação dos dados experimentais (exp) e calculados (calc) em relação ao (a) modelo de Avrami e (b) difusão intrapartícula, a 25°C.

Pelo modelo de difusão intrapartícula obtiveram-se as constantes de difusão intrapartícula, k_{dif} ($\text{J g}^{-1} \text{ min}^{-1/2}$) e a constante C (J g^{-1}), relacionada com a dificuldade de difusão.

Conclusões

A interação da droga com o material Quit-Cu apresentou os maiores valores de constantes de velocidade, segundo o modelo de Avrami, sendo concordantes com os tempos de interação obtidos por calorimetria isotérmica. A partir do modelo de difusão pôde-se verificar que os valores da constante k_{dif} são inversamente proporcionais aos valores da constante C , para os três materiais estudados.

Agradecimentos

À CAPES e ao CNPq.

¹Vieira, E.F.S.; Cestari, A.R.; Silva, R.G.; Pinto, A.A.; Miranda, C.R.; Conceição, A.C.F., *Thermochim. Acta* **2004**, *419*, 45.

²Cestari, A.R.; Vieira, E.F.S.; da Rocha, F.C., *Thermochim. Acta*, **2005**, 430, 211-215.

³Lopes, E.C.N.; dos Anjos, F.S.C.; Vieira, E.F.S.; Cestari, A.C., *J. Colloid Interf. Sci.* **2003**, 263, 542.

⁴Cestari, A.R.; Vieira, E.F.S.; dos Santos, A.G.P.; Mota, J.A., *J. Colloid Interf. Sci.* **2004**, 280, 380.