

Espectroscopia Raman de imagem e Mínimos Quadrados Clássicos (CLS) para caracterização de pellets de diclofenaco de sódio

André M. de Souza^{*1}(PG), Márcia C. Breitreitz¹(PG), Guilherme P. Sabin¹ (PG), Patrícia da Fonseca² (PQ), Lupercio Calefe² (PQ), Mario Moffa² (PQ), Ronei J. Poppi¹ (PQ). *amsouza.iqm@gmail.com

¹UNICAMP – Instituto de Química - Caixa Postal 6154 – CEP 13084-971 – Campinas – SP – Brasil.

²Zelus Serviços para Indústria Farmacêutica Ltda., Av. Professor Lineu Prestes n. 2242, São Paulo, SP, Brasil.

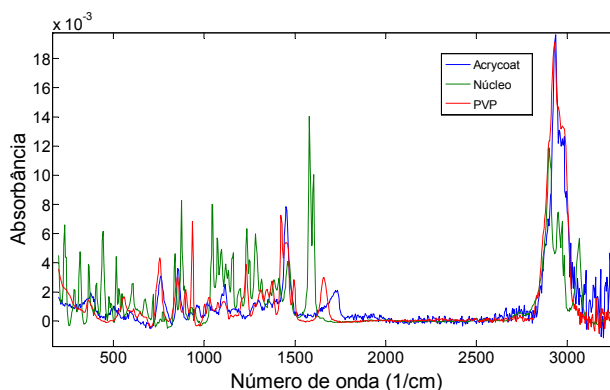
Palavras Chave: *Espectroscopia Raman, pellets, CLS.*

Introdução

Espectroscopia Raman de imagem (ERI) combina espectroscopia Raman com tecnologia de imagem digital, a fim de visualizar a composição química do material e sua estrutura molecular¹. O objetivo deste trabalho foi empregar ERI e tratamento multivariado das imagens por Mínimos Quadrados Clássicos (CLS) para a caracterização de pellets de diclofenaco de sódio. Os pellets foram analisados empregando equipamento Raman Station 400, com laser de 785nm, resolução 4cm⁻¹, faixa espectral 200-3200nm, área de 1,96mm² e pixel de 50µm. O tratamento das imagens foi realizado no ambiente Matlab®.

Resultados e Discussão

A Figura 1 apresenta os espectros normalizados dos constituintes do pellet de diclofenaco: Acrycoat®, núcleo (considerando todos seus constituintes) e polivinilpirrolidona (PVP), onde é possível observar que não existe um pico seletivo para cada um dos constituintes do pellet, com os quais o tratamento univariado pudesse ser realizado justificando a aplicação de métodos multivariados de análise de imagem. O método dos Mínimos Quadrados Clássicos (CLS) é um método quantitativo que assume que cada medida é a soma de sinais linearmente independentes, ou seja, que o espectro em cada pixel é a soma de todos os espectros dos componentes puros ponderadas pelas suas concentrações. A Figura 2 apresenta os mapas de distribuição de um pellet de diclofenaco de sódio (corte transversal) por CLS.



Na Figura 2a e 2c é possível observar a distribuição do Acrycoat® e do PVP nas camadas mais externas do pellet, enquanto que na Figura 2b é possível observar os constituintes do núcleo distribuídos no centro do pellet.

Conclusões

A distribuição dos componentes químicos nas camadas e no núcleo é um parâmetro muito importante para a liberação adequada do fármaco nos pellets farmacêuticos. Este trabalho descreve uma alternativa promissora para este propósito através da ERI e CLS.

Agradecimentos

CAPES, CNPQ e FAPESP.

¹ Treado, P. J.; Matthew, P. N. Em *Raman Spectroscopy: From the Research Laboratory to the Process Line*; Lewis, I. R.; Edwards H. G. M., eds.: Marcel Decker: Nova York, 2001, cap. 5.

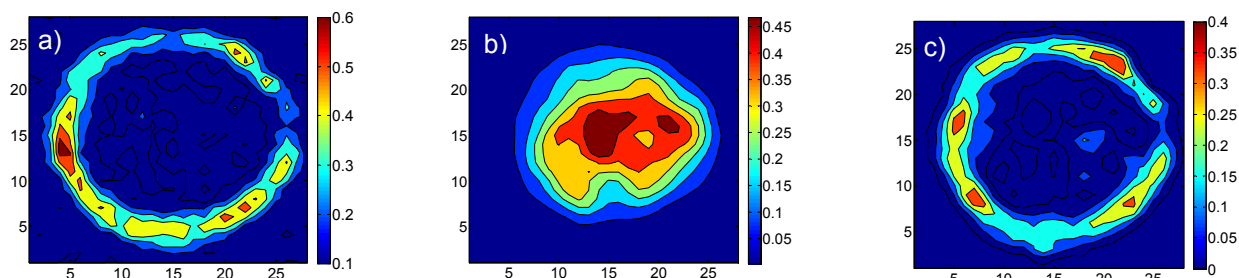


Figura 2: Imagem Raman resultante do tratamento com CLS para os constituintes do pellet: a) acrycoat, b) núcleo e c) PVP.