

Controle de qualidade do paracetamol utilizando quimiometria e espectroscopia de imagem na região do infravermelho próximo

Mariana Baptistão¹ (IC)*, Werickson F. de Carvalho Rocha¹ (PG), Ronei J. Poppi¹ (PQ)
marianabaptistao@gmail.com.br

¹ Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, UNICAMP. C. P. 6154, CEP13083-970, Campinas-SP.

Palavras Chave: Espectroscopia de imagem, paracetamol, quimiometria.

Introdução

O controle de qualidade é uma ferramenta importante para a indústria farmacêutica, pois garante um produto seguro e eficaz. Baseado nisso, este trabalho utilizou a espectroscopia de imagem na região do infravermelho próximo e ferramentas quimiométricas para a quantificação e identificação dos constituintes presentes em formulações farmacêuticas do fármaco paracetamol. Também foram desenvolvidos mapas de distribuição de concentração para certificar o processo de controle de qualidade da droga utilizando o parâmetro denominado uniformidade de conteúdo.

Resultados e Discussão

Foram preparadas 31 formulações farmacêuticas do fármaco a partir da homogeneização e pastilhamento do princípio ativo paracetamol e excipientes (amido, celulose, lactose, estearato de magnésio e talco). Elas continham o princípio ativo variando de 2% em 2% na faixa de 30% (m/m) até 90% (m/m). Os dados espectrais foram obtidos usando o Spotlight 400N FT-NIR Imaging System da Perkin-Elmer e geraram em cada comprimido uma matriz tridimensional de dados (100 pixels x 100 pixels e 239 comprimentos de onda) que com auxílio do MATLAB 7.5 e PLS-toolbox 4.2 foi desdobrada em uma matriz bidimensional.

As imagens foram obtidas na faixa de 7800 cm^{-1} a 4000 cm^{-1} com $50\mu\text{m}$ de tamanho de pixel e $5\text{mm} \times 5\text{mm}$ de área da imagem. Para desenvolver o modelo foram utilizados dois conjuntos de amostras: calibração (20 amostras) e validação (11 amostras). Esses conjuntos foram formados usando os espectros médios de cada amostra, que foram pré-processados com primeira derivada. Depois disso, o método PCA foi utilizado para obter informações de distribuição em cada pixel da amostra; já o modelo PLS foi usado para obter os mapas de distribuição dos constituintes.

Os resultados obtidos com o PLS estão apresentados na tabela 1. Os resultados dos valores previstos contra os valores esperados para excipiente e paracetamol são apresentados na figura 1. Já a análise dos mapas de distribuição de concentração mostrou a complementaridade de

distribuição entre o princípio ativo e o excipiente nos comprimidos como visto na figura 2.

Tabela 1 - Resultados da análise com PLS

	RMSEC %(m/m)	RMSEP %(m/m)	R ² cal.	R ² val.
Paracetamol	5,4	3,5	0.90	0.93
Excipiente	4,8	2,3	0.90	0.95

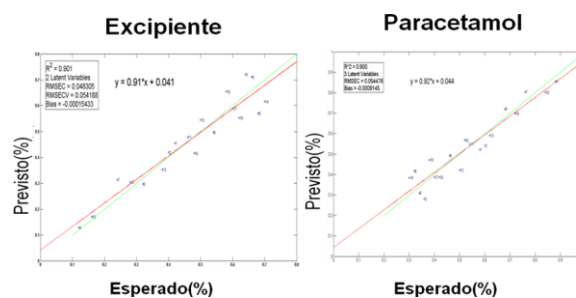


Figura 1. Gráfico previsto versus valores de referências do paracetamol feito com PLS

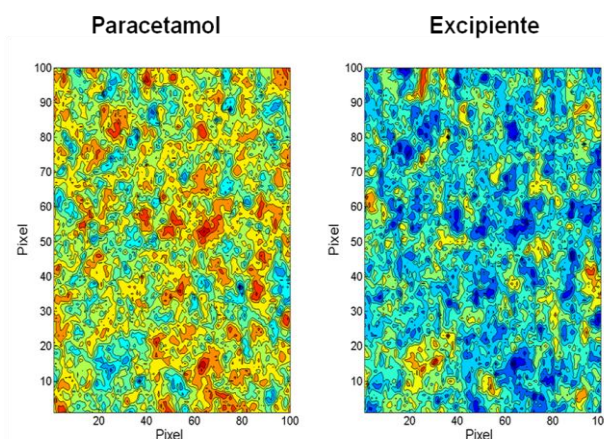


Figura 2. Mapas de distribuição obtidos com PLS para paracetamol e excipiente.

Conclusões

Este trabalho mostrou que o método pode ser utilizado para determinar a concentração de paracetamol e excipientes nos comprimidos para verificação de sua uniformidade de conteúdo.

Agradecimentos

Capes, CNPq e FAPESP