

Estudo termoanalítico de um complexo de ítrio(III) com o fármaco ibuprofeno no estado sólido

Bruno B. C. Holanda (PG)*, Renan B. Guerra (PG), Gilbert Bannach (PQ), Alexandre O. Legendre (PQ)

Faculdade de Ciências, Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Bauru-SP, Brasil
e-mail: brunobarreto_79@hotmail.com

Palavras Chave: *ibuprofeno, análise térmica, ítrio(III)*.

Introdução

O ibuprofeno (*Hibu*) é um fármaco pertencente ao grupo dos anti-inflamatórios não-esteróides e ao subgrupo dos derivados do ácido propiônico e tem a capacidade de combater inflamações, dores e febre, embora seus efeitos.¹⁻² Além dos aspectos inerentes à pesquisa básica, compostos de coordenação tem sido bastante explorados recentemente devido às suas potenciais aplicações como metalofármacos, uma vez que existe a possibilidade de se produzir um efeito sinérgico entre o fármaco e o metal ou mesmo modificar as características farmacocinéticas com o intuito de melhorar o desempenho do medicamento.² Métodos termoanalíticos são amplamente utilizados para verificar a estabilidade térmica, polimorfismo, reações no estado sólido, pureza e outras propriedades de fármacos, além de fornecer informações acerca das etapas de decomposição térmica e estequiometria de complexos metálicos.³⁻⁴ Este trabalho teve como objetivos sintetizar um complexo de ítrio(III) com o ligante ibuprofeno e estudá-lo por espectroscopia vibracional na região do infravermelho (IV) e por termogravimetria-análise térmica diferencial simultâneas (TG-DTA).⁴

Resultados e Discussão

As curvas TG-DTA do complexo $[Y(ibuprofeno)_3]$ são mostradas na Figura 1 enquanto os dados analíticos são dados na Tabela 1. Observou-se que há uma pequena perda de massa até 180°C devido à água adsorvida na superfície da amostra. A partir de então, o composto sofre quatro perdas consecutivas até a formação do resíduo final. Estas perdas de massa, decorrentes da decomposição do ligante orgânico, produzem pequenos picos exotérmicos na DTA e, provavelmente, se devem a reações endotérmicas e exotérmicas simultâneas. Já na última etapa, quando ocorre a queima da matéria orgânica remanescente, surge um intenso pico exotérmico na DTA. O espectro no infravermelho do composto permite, com base no cálculo da diferença entre as posições das bandas referentes aos estiramentos simétrico (ν_s) e assimétrico (ν_a) do grupo carboxilato (Δ_1) inferir o modo de coordenação do ligante no complexo.⁵

Tabela 1. Dados termoanalíticos do $[Y(ibuprofeno)_3]$.

Metal / %		Ibu / %		Resíduo (Y_2O_3) / %	
Calc.	TG	Calc.	TG	Calc.	TG
12,36	13,08	82,72	81,80	15,95	16,61

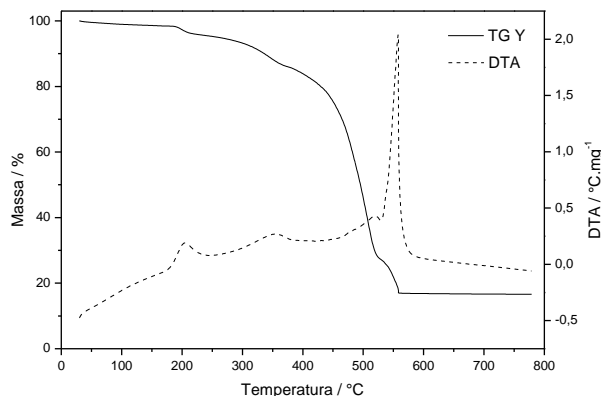


Figura 1. Curvas TG-DTA do $[Y(ibuprofeno)_3]$

Conclusões

Com base nas curvas TG-DTA estabeleceu-se a estequiometria entre o metal e o ligante ibuprofeno. As curvas TG-DTA mostraram que havia moléculas de água adsorvidas, já que a perda foi lenta, não-estequiométrica e não gerou nenhum sinal endotérmico na DTA. O complexo é estável até 180°C, quando se inicia sua decomposição térmica, que ocorre em quatro etapas consecutivas até a queima total da matéria orgânica com formação do óxido de ítrio. Não foi possível isolar intermediários. Os dados espectroscópicos no infravermelho sugerem que o grupo carboxilato do ibuprofeno coordena-se com ao metal através de uma ligação bidentada quelante e também em ponte, pois a diferença no valor de Δ_1 não foi baixa o suficiente ($<100\text{ cm}^{-1}$) para caracterizá-la como quelante apenas.

Agradecimentos

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), à Faculdade de Ciências da UNESP – Campus de Bauru e ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais (POSMAT).

¹ Higgins, J.D.; Gilmore, T.P.; Martellucci, S.A.; Bruce, R.D.; Brittain, H.G. Analytical Profiles of Drug Substances, Vol. 27, p. 265-269. (2001)

² Wang, K.; Li, R.; Cheng Y.; Zhu, B. Lanthanides – the future drugs?. Coordination Chemistry Reviews. 1999;190-192: 297-308.

³ Giron, D.; Mutz, M.; Garnier, S. Journal of Thermal Solid-state of pharmaceutical compounds. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. 2004, 77(2), 709-747.

⁴ Galico, D.A, Holanda, B.B.C.; Guerra, R.B.; Legendre, A.O.; Rinaldo, D.; Treu-Filho, O.; Bannach, G. Thermal and spectroscopic studies on solid ibuprofen complexes of lighter trivalent lanthanides. Termochimica Acta. Vol. 575, p. 226-232 (2014)

⁵ Deacon, G.B.; Phillips, R.J. Relationships Between the Carbon-Oxygen Stretching Frequencies of Carboxylate Complexes and the Type of Carboxylate Coordination. Coordination Chemistry Reviews. 1980;33:227-50.