SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DO IFG

ANÁLISE EXPLORATÓRIA NÃO INVASIVA DE MEDICAMENTOS UTILIZANDO IMAGENS DIGITAIS

LINHARES, Júlio César Sena
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás, Câmpus Luziânia.

SENA, Emmanuel Messias
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás, Câmpus Luziânia.

MEIRA, Cibelle Eduarda Reis
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás, Câmpus Luziânia.

COSTA, Bruno Elias dos Santos
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás, Câmpus Luziânia.

O uso de ferramentas para tratamento de dados mutidimensionais como a Análise por Componentes Principais (PCA), tem contribuído significativamente para explorar e identificar o perfil químico de amostras de medicamentos, tornando-se útil como um recurso quimiométrico para categorizar a conformabilidade dessas amostras com o padrão de qualidade esperado. Neste trabalho, a PCA foi aplicada para categorizar o perfil de constituição e dosagem dos medicamentos Diclofenaco, Paracetamol e Ibuprofeno obtidos a partir de três diferentes fabricantes para cada fármaco. Para tanto, foi construído um circuito eletrônico de emissão de luz infravermelha diretamente sobre o medicamento nas formas de comprimido (inteiro e macerado), do qual foi possível obter imagens da distribuição do princípio ativo por absorção da radiação infravermelha, reveladas através de uma câmera térmica. As imagens capturadas foram submetidas a composição dos histogramas do modelo de cores RGB, selecionando uma região de interesse do qual foi obtida uma matriz de dados desdobrados que foi tratada por PCA. Os resultados indicaram que o PCA obtido pelos

comprimidos inteiros foi capaz de extrair maiores informações (com 78,1% de variância explicada) do que com os comprimidos macerados (62,82% de variância explicada) com apenas 2 componentes principais. Os *scores* das amostras revelaram que as amostras de Diclofenaco tem um perfil químico distinto em comparação com a maioria das amostras, e que a marca 1 de todos os fármacos também pode ser considerada à parte em comparação com as marcas 2 e 3. Em seguida, foi realizado um estudo de calibração em fase sólida, com proporções definidas pelas misturas entre o pó do medicamento e amido de milho utilizado como excipiente, obtendo dosagens na faixa de 25%-100% (m/m). A calibração foi realizada de forma univariada, tomando-se a média dos sinais de distribuições dos *pixels* para cada canal R, G e B. Os resultados obtidos foram promissores, indicando correlações entre a dosagem e o sinal analítico possíveis de serem modelados. Das nove calibrações obtidas (3 medicamentos x 3 marcas), foi verificado um razoável ajuste linear para o medicamento Diclofenaco da marca 1, obtendo-se coeficiente de determinação 0,9606. Maior sensibilidade foi obtida para o medicamento Paracetamol da marca 2 (m=0,00131). Do conjunto de amostras, o Diclofenaco da marca 3 apresentou pior desempenho de calibração, devido à incompatibilidade da matriz excipiente do comprimido. Foi realizado também uma PCA geral de todas as amostras em todas as dosagens estudadas, do qual foi observado uma categorização consistente com as PCA's obtidas anteriormente, frente aos agrupamentos relativos ao princípio ativo dos medicamentos. A maior eficiência da aplicação dos comprimidos inteiro abre uma possibilidade de investigação não invasiva, utilizando sistemas analíticos alternativos, adaptados aos dispositivos de imagens digitais de forma mais acessível e portátil.

Palavras-chave

diclofenaco; ibuprofeno; paracetamol; RGB; quimiometria.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás. Agradecemos ao CNPq pela bolsa concedida.