

PESQUISA/INICIAÇÃO CIENTÍFICA - PESQUISA/ INICIAÇÃO CIENTÍFICA

**DESENVOLVIMENTO DE METODOLOGIA TERMOCINÉTICA PARA
AVALIAÇÃO DE METALOFÁRMACOS COM TERRAS RARAS: APLICAÇÃO
AO COMPLEXO La^{3+} -IBUPROFENO**

Nelicy Heloisa Corrêa Da Rosa (nelicy.rosa074@academico.ufgd.edu.br)

Tiago Andre Denck Colman (tiagocolman@ufgd.edu.br)

O desenvolvimento de metodologias termoanalíticas e termocinéticas aplicadas a compostos de coordenação com potencial farmacêutico é essencial para compreender estabilidade térmica, mecanismos de decomposição e viabilidade de aplicação. Este trabalho teve como objetivo estabelecer e validar um protocolo padronizado para avaliação termoanalítica do complexo La^{3+} -ibuprofeno, empregando termogravimetria (TG), calorimetria exploratória diferencial (DSC) e modelagem cinética não-isotérmica, seguindo diretrizes ICTAC. O composto foi sintetizado por reação de metátese entre cloreto de lantânio e sal de sódio do ibuprofeno, com ajuste de pH, filtração, secagem e armazenamento em dessecador, adaptando metodologia descrita em. A caracterização por CHN, FTIR e DRX confirmou a coordenação bidentada do ligante e padrão semicristalino. As análises TG/DTG/DSC foram conduzidas sob N_2 (50 mL min^{-1}), cadinhos de alumina, massa de $1,001 \pm 0,009 \text{ mg}$ e razões de aquecimento de 5, 10, 15 e 20 K min^{-1} . O perfil térmico apresentou três eventos: desolvatação ($30\text{--}110 \text{ }^\circ\text{C}$; perda 4,1 %; endotérmico), decomposição do ligante ($210\text{--}370 \text{ }^\circ\text{C}$; perda 59,2 %; exotérmico) e formação de La_2O_3 ($650\text{--}800 \text{ }^\circ\text{C}$, em ar). A cinética, pelos métodos KAS e FWO, indicou energia de ativação média de $124 \pm 4 \text{ kJ mol}^{-1}$ para a degradação orgânica,

com perfil $E\alpha(\alpha)$ e master plots [4] apontando mecanismo de nucleação e crescimento bidimensional (A_2). Como produto tecnológico, desenvolveu-se script em Python para importação de dados TG/DSC, cálculo de $E\alpha$ por KAS, FWO e Vyazovkin, geração de gráficos $\alpha \times T$ e $E\alpha \times \alpha$ e emissão de relatórios PDF, registrado no INPI. O protocolo mostrou-se robusto e reprodutível, com potencial de aplicação na triagem de metalofármacos, atendendo boas práticas ICTAC e contribuindo para padronização de avaliações termoanalíticas no desenvolvimento de complexos metálicos de interesse farmacêutico.

Agradecemos ao CNPq pelo fomento concedido, que possibilitou a execução deste trabalho no âmbito do PIBITI/UFGD.

Palavras-chave: análise térmica; cinética em estado sólido; metalofármacos.