

TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS UTILIZADAS NA CARACTERIZAÇÃO DE FÁRMACOS: UMA BREVE REVISÃO

VII Congresso Online Nacional de Química, 7ª edição, de 23/06/2025 a 25/06/2025
ISBN dos Anais: 978-65-5465-148-6

SANTOS; Jersyára Costa¹, MONTE; Zenaide Severina do²

RESUMO

A busca por terapias curativas evoluiu do uso milenar de produtos naturais para o planejamento racional de fármacos, processo que exige altos investimentos e rigor científico. Atualmente, o desenvolvimento foca na identificação de alvos biológicos e na síntese de moléculas complexas, preferencialmente tridimensionais, para garantir maior simbiose com o organismo humano. Assim, os métodos espectroscópicos são cruciais para assegurar a qualidade, eficácia e segurança dos medicamentos, permitindo a elucidação estrutural de princípios ativos e excipientes. A análise da relação estrutura-atividade e das propriedades farmacocinéticas é essencial para estabelecer a seletividade e estabilidade das moléculas, especialmente na distinção de enantiômeros, cujas diferenças estereoquímicas impactam diretamente o comportamento biológico. Inovações na área buscam técnicas mais rápidas, sustentáveis e precisas, como a RMN e o FT-IR, fundamentais para determinar níveis energéticos e conformações moleculares. Essas ferramentas possibilitam tanto a descoberta de novos fármacos quanto o aprimoramento de substâncias existentes, otimizando propriedades organolépticas e reduzindo custos produtivos conforme as exigências regulatórias. Objetivou-se identificar os métodos espectroscópicos predominantes para caracterizar fármacos novos ou aprimorados, descrevendo os cinco principais. Como metodologia, adotou-se uma revisão integrativa qualitativa (2020–2025) nas bases SciELO, Science Direct, BVS e Google Acadêmico, utilizando descritores: "caracterização de fármacos" e "espectroscopia". Selecionaram-se artigos originais e de revisão em português e inglês relacionados ao tema. Após aplicar critérios de exclusão e filtros de relevância, interpretou-se, criticamente, os dados sobre quais métodos espectroscópicos foram mais utilizados para caracterizar fármacos. A pesquisa inicial identificou 11.631 artigos, reduzidos para 39 após filtros que incluíram, entre outros, abordagens sobre fraudes ou métodos puramente separativos. Observou-se que não há um método universal isolado; 46% dos estudos exigiram abordagens multimodais, integrando espectroscopia a técnicas como cromatografia e eletroquímica. O FT-IR destacou-se pela versatilidade em 82% dos casos, sendo a principal ferramenta para validar aprimoramentos em fármacos já existentes. Já a RMN e a Espectrometria de Massas foram fundamentais na elucidação estrutural de moléculas inéditas. As cinco principais técnicas espectroscópicas para caracterização farmacêutica possuem fundamentos distintos: o **FT-IR** identifica grupos funcionais via vibrações moleculares com alta sensibilidade; o **Raman** oferece análise estrutural não destrutiva e direta em diversos estados físicos. O **UV-VIS** quantifica substâncias através da excitação eletrônica de cromóforos. Para

¹ Centro Universitário UNIFACOL, jersyarac.santos@unifacol.edu.br
² Centro Universitário UNIFACOL, zenaides.monte@unifacol.edu.br

elucidação estrutural completa e estudo de polimorfismos, a **RMN** é a ferramenta definitiva. Já a **Espectrometria de Massas (EM)** caracteriza princípios ativos e metabólitos pela relação massa/carga, sendo essencial para detecção de traços e impurezas com alta resolução. Conclui-se que os métodos espectroscópicos são vitais na caracterização farmacêutica, embora 46% dos estudos demonstrem que a análise completa exige abordagens multimodais ou combinadas, demonstrando a inviabilidade do uso de um único método. O **FT-IR** destaca-se como a técnica mais versátil, sendo essencial na identificação e no aprimoramento de formulações já existentes. Em contrapartida, a **RMN** e a **Espectrometria de Massas (EM)** são fundamentais para a elucidação da estrutura molecular de fármacos inéditos. Assim, a escolha metodológica depende do estágio de desenvolvimento do fármaco, onde a integração de diferentes técnicas garante a precisão necessária para a aprovação e segurança das entidades terapêuticas.

PALAVRAS-CHAVE: Caracterização de fármacos, Espectroscopia, RMN, FT-IR, UV-Vis