

TEMAS DE MESTRADO

AP-6: TERMODINÂMICA E PROCESSOS DE SEPARAÇÃO

EDITAL Nº 05/2022 – INGRESSO NO 1º SEMESTRE DE 2023

OBSERVAÇÃO: PARA CONTACTAR O DOCENTE, ACESSE <https://www.ppgeq.ufscar.br/pt-br/docentes>

ÁREA DE PESQUISA: Termodinâmica e Processos de Separação

DOCENTE ORIENTADOR: André Bernardo

TÍTULO: Cristalização de moléculas complexas

RESUMO

A Cristalização é a operação predominante na formação de partículas sólidas nas indústrias química e farmacêutica. Estima-se que 70% de todo material sólido – e 90% dos princípios ativos farmacêuticos – seja produzido por cristalização. Especificamente nas indústrias de química fina e farmacêutica, emprega-se extensivamente a cristalização por adição de antissolvente, pois é comum que o soluto seja muito solúvel no solvente original ou instável em temperaturas mais altas.

Neste contexto, o objetivo deste trabalho é estimar parâmetros cinéticos da cristalização, nucleação, crescimento e aglomeração, levando em conta fenômenos secundários como a transição de polimorfos ou solvatomorfos. A estimação é feita em ensaios de batelada alimentada nos quais são monitoradas propriedades da solução – temperatura e índice de refração – e dos cristais – turbidez e/ou distribuição de comprimento de corda.

Os parâmetros cinéticos estimados serão validados em ensaios adicionais de cristalização, e posteriormente utilizados na produção de cristais com qualidade otimizada.

Palavras-chaves: cristalização; fármacos; aminoácidos.

ÁREA DE PESQUISA: Termodinâmica e Processos de Separação

DOCENTE ORIENTADOR: André Bernardo

TÍTULO: Determinação dos equilíbrios sólido-líquido e líquido vapor de moléculas complexas

RESUMO

Moléculas utilizadas como ingredientes farmacêuticos ativos (IFA) e aminoácidos têm uma complexidade estrutural que levam à alta probabilidade de ocorrência de fenômenos como o polimorfismo e o solvatomorfismo. Tais fenômenos podem ter impacto comercial – como na proteção de patentes e no tempo de prateleira – e farmacológicos – como a biodisponibilidade de medicamentos.

Neste contexto, este trabalho propõe a determinação do equilíbrio sólido-líquido IFA em mistura de solventes de grau farmacológico e alimentício (água-etanol e água-propileno glicol), e em diferentes temperaturas, e o ajuste desses dados experimentais com diferentes modelos termodinâmicos. As medidas serão feitas, em princípio, pelo método isotérmico.

Como a utilização de solventes orgânicos impõe a produção de um efluente também complexo, o efeito desses solutos no equilíbrio líquido-vapor na mistura será estudado por meio de medidas de ebuliometria, e o ajuste dos resultados por diferentes modelos termodinâmicos.

Palavras-chaves: solubilidade; equilíbrio líquido-vapor; fármacos; aminoácidos.