

O crescente aumento na geração de resíduos tóxicos pela sociedade, associado à preocupação com o ambiente e o desenvolvimento sustentável, cria a necessidade de desenvolver e aperfeiçoar processos que eliminem ou diminuam os efeitos destes compostos. Os processos oxidativos avançados (POAs) têm se mostrado como uma alternativa eficiente no tratamento de efluentes contendo compostos orgânicos persistentes, difíceis de serem removidos por processos tradicionais. Idealmente, este tratamento resulta em produtos menos tóxicos, não nocivos ao meio ambiente e aos seres vivos que posteriormente consumirão a água. O estudo destes processos em escala laboratorial é dispendioso e lento, e a avaliação dos mecanismos da degradação e a formação de compostos intermediários e produtos, que por vezes são tão tóxicos que o composto original, é uma tarefa complexa. Desta forma, o objetivo deste projeto é investigar os mecanismos de reação de degradação de diversos compostos orgânicos poluentes, tais como fármacos, solventes e corantes sintéticos, por ação de radicais hidroxila (*OH) através de simulações de dinâmica molecular. Estas simulações foram conduzidas sob temperatura e volume constantes, e um potencial reativo clássico foi utilizado na descrição das interações interatômicas. Este método nos permite obter informações detalhadas do processo em nível microscópico; realizamos simulações da reação de radicais *OHs com diferentes compostos orgânicos para determinar os produtos finais e intermediários das reações, os parâmetros cinéticos e termodinâmicos associados, e identificar as etapas determinantes. Em um primeiro momento, os resultados das simulações serão validados com resultados experimentais existentes na literatura, de modo a verificar a fidelidade da metodologia. Os resultados preliminares obtidos mostraram-se promissores quando comparados com resultados experimentais da literatura. Além do mais, o uso de simulações de dinâmica molecular nos possibilita avaliar o processo sob diversas condições, contribuindo de forma sinérgica com estudos experimentais, reduzindo o número de experimentos, e diminuindo custos e tempo de análise. Apesar de ser um processo muito promissor, há ainda muitas incertezas sobre os mecanismos de degradação envolvidos nos POAs. A combinação de estudos teóricos como este com trabalhos experimentais se mostra uma poderosa ferramenta no desenvolvimento de processos oxidativos seguros e eficientes.