



**Universidade:
presente!**

UFRGS
PROPEAQ



XXXI SIC

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

Evento	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2019
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	ESTUDO DA ADSORÇÃO DO DICLOFENACO DE SÓDIO UTILIZANDO O BIOPOLÍMERO DE CELULOSE VIA SIMULAÇÃO AB INITIO E AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL
Autor	MARIELE DALMOLIN DA SILVA
Orientador	WILLIAM LEONARDO DA SILVA

ESTUDO DA ADSORÇÃO DO DICLOFENACO DE SÓDIO UTILIZANDO O BIOPOLÍMERO DE CELULOSE VIA SIMULAÇÃO *AB INITIO* E AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL

Mariele D. da Silva, Willian L. da Silva
Centro Universitário Franciscano

Os fármacos são atualmente considerados contaminantes presentes em águas, solos e sedimentos podendo causar diversos efeitos em organismos aquáticos e na saúde humana. Desse modo, devido a incompleta remoção e degradação de compostos orgânicos (fármacos) na área de tratamentos de esgotos (ETEs), é de expressa importância a criação de novas tecnologias e/ou processos complementares de tratamento para a remoção. Assim, o principal objetivo deste trabalho é avaliar a eficiência de remoção do diclofenaco de sódio em solução aquosa utilizando o biopolímero de celulose, realizando um estudo teórico de primeiros princípios e experimental. O biopolímero de celulose foi extraído conforme adaptação da metodologia (CASEY, 1980) onde, inicialmente, foram hidratados 50 g da folha branqueada em 1000 mL de água destilada por 24 horas, seguido da trituração do material com a água. Assim, a celulignina obtida foi deslignificada com uma solução de NaOH 1% por 12 horas, obtendo-se a polpa bruta. Por fim, essa foi seca em uma estufa (DeLeo, Modelo: A53E) à 50°C por 12 horas, durante 5 dias. Além disso, o biossorbente de celulose foi caracterizado por porosimetria de nitrogênio e difração de raios X, a fim de avaliar suas propriedades texturais e estruturais. Os ensaios de adsorção foram realizados utilizando o fármaco diclofenaco de sódio como adsorvato, determinando a sua capacidade de remoção do fármaco e os parâmetros cinéticos dos modelos de isoterma de Langmuir e Freundlich. Além disso, um estudo teórico *ab initio*, será utilizado para avaliar as propriedades estruturais e eletrônicas das interações entre o fármaco e o biopolímero, a qual será baseada na Teoria do Funcional da Densidade (*Density Functional Theory* – DFT). Esta teoria está associada com o método de pseudopotenciais, que consiste em descrever os elétrons que participam efetivamente das ligações químicas e encontra-se implementada no código computacional SIESTA (*Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousand of Atoms*) com o qual realizaremos os cálculos autoconsistentes. Para descrever a interação de troca e correlação utilizamos a aproximação da densidade local (*Local Density Approximation* - LDA). Nesse contexto, a caracterização do biopolímero apresenta os resultados da área superficial, volume e diâmetro de poros do biossorbente. Conforme a IUPAC (*International Union of Pure and Applied Chemistry*), o biossorbente apresenta característica de um material mesoporo, visto que o diâmetro de poro se encontra entre 2 e 50 nm, além disso apresentou um volume elevado, ideal para a difusão intrapartícula do fármaco até o sítio ativo, apresentando uma área específica (S_{BET}) de $206 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$, o diâmetro (D_p) 22,5 nm e o volume (V_p) de poros do biossorbente de celulose $0,92 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1}$. O efeito do tempo de contato na eficiência da adsorção, indicando que o processo foi bastante rápido, sendo o equilíbrio alcançado em cerca de 10 min. Assim, avaliando o coeficiente de determinação (r^2), pelos os parâmetros cinéticos obtidos dos modelos de isotermas de Freundlich e Langmuir ambos apresentaram um ajuste satisfatório dos resultados. Destaca-se que a isoterma de Freundlich apresentou um maior uma distribuição logarítmica de sítios ativos, admitindo uma adsorção em multicamadas e interação entre as moléculas de adsorvato, característico de uma adsorção heterogênea. Com o presente trabalho foi possível avaliar a capacidade de adsorção do diclofenaco de sódio utilizando um biossorbente de celulose, o qual foi uma alternativa para a remoção deste fármaco e conseqüentemente o estudo teórico possa estar de acordo com os resultados experimentais.