

Introdução e Objetivo

A contaminação de águas superficiais por fármacos é um problema que as redes de abastecimento de água enfrentam, o qual é agravado pelo crescente consumo de drogas pela sociedade moderna. Os Processos Oxidativos Avançados se apresentam como uma alternativa para solucionar esse problema ambiental, pois agem quebrando as moléculas orgânicas poluentes, ao invés de apenas removê-las para outra fase. A fotocatalise heterogênea é um desses processos e foi utilizada no presente trabalho visando estudar a cinética da reação de degradação do fármaco atorvastatina.

Materiais e Métodos

Os ensaios foram realizados em um reator *slurry*, com controle de temperatura, tendo como fonte de irradiação uma lâmpada de vapor de mercúrio com bulbo modificado. Como catalisador foi utilizado o TiO_2 (Degussa P25) imobilizado em placas de vidro. O volume inicial da solução foi de 25 ml. Após o reator ser carregado, era mantido no escuro por 1 hora, sob agitação. Com a exposição à luz, se iniciava a reação. Amostras eram coletadas em intervalos regulares de tempo e analisadas no espectrofotômetro UV-Vis. O aparato experimental utilizado no presente trabalho pode ser visto na Figura 1.

Resultados

Partiu-se da hipótese que a reação obedeceria uma cinética de pseudo-primeira ordem. Para verificar se esta hipótese era verdadeira, fez-se uma série de ensaios para obter a curva do decaimento da concentração em função do tempo. Relacionando-se $\ln(C_0/C)$ com o tempo encontrou-se uma reta que cruza a origem dos eixos coordenados, o que indica uma cinética de pseudo-primeira ordem. Tal pode ser visto na Figura 3.

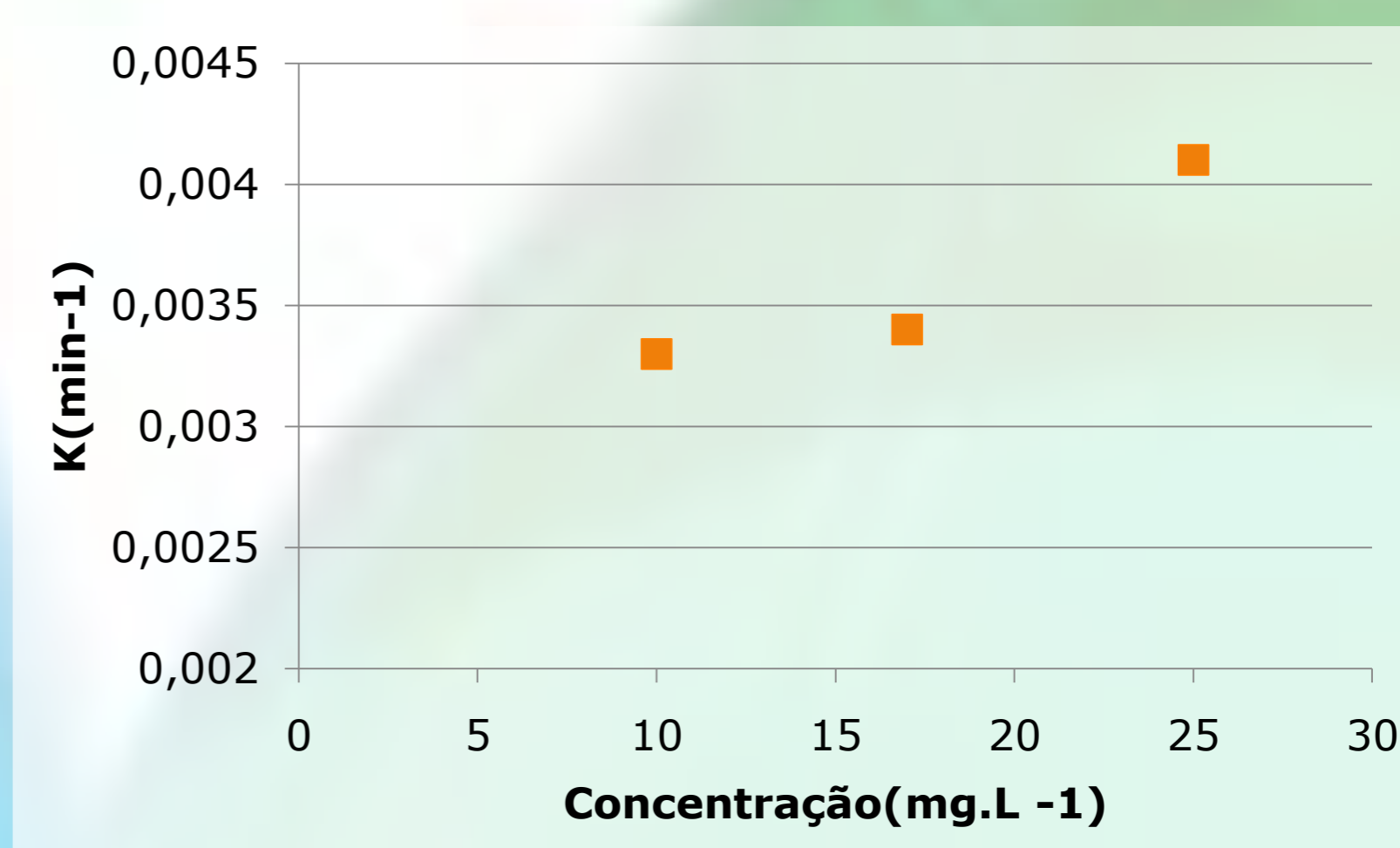


Figura 4. Determinação da concentração ideal de atorvastatina.

✓ Influência da concentração

Ensaio com diferentes concentrações iniciais de fármaco foram realizados, tendo sido calculadas as velocidades específicas, k (min^{-1}), das diversas reações. A maior taxa de degradação da atorvastatina foi obtida na concentração de 25 mg L^{-1} como pode ser visto na Figura 4.

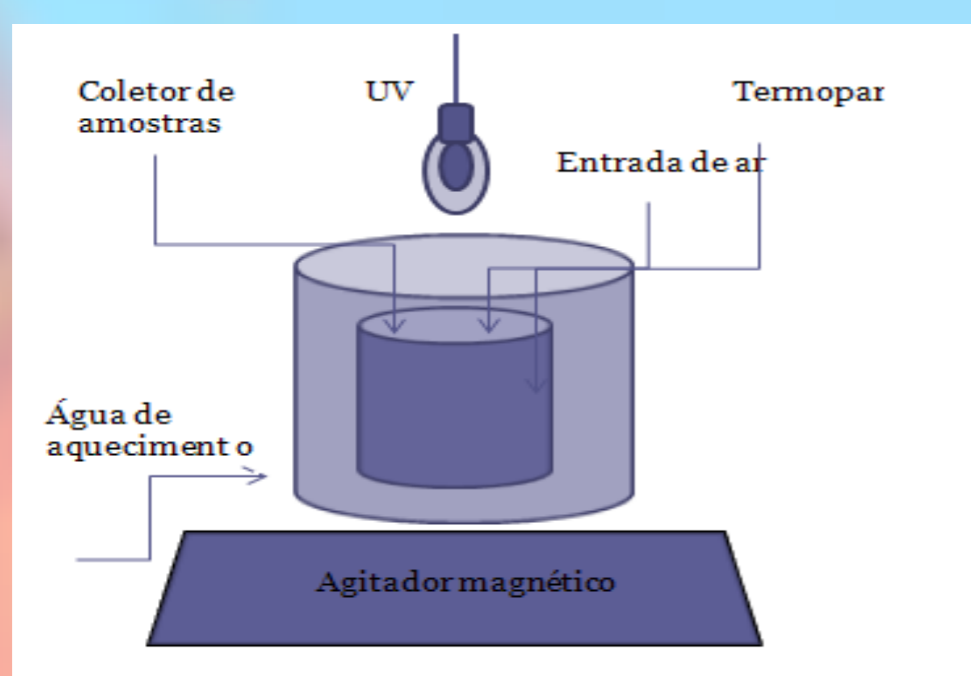


Figura 1. Esquema do reator fotocatalítico utilizado.

✓ Influência do pH do meio

Mantendo-se as demais condições fixas (concentração ótima, 30°C) e variando o pH entre 5 e 10, como mostra a Figura 5, foi possível verificar que a maior taxa ocorre no pH 7, o que coincide aproximadamente com o ponto isoelétrico do TiO_2 .

✓ Influência da temperatura

Os ensaios para a determinação da energia de ativação ainda estão em andamento, Tabela 1. Sabe-se, através da literatura, que a temperatura não apresenta influência notável, já que a energia de ativação da reação é baixa.

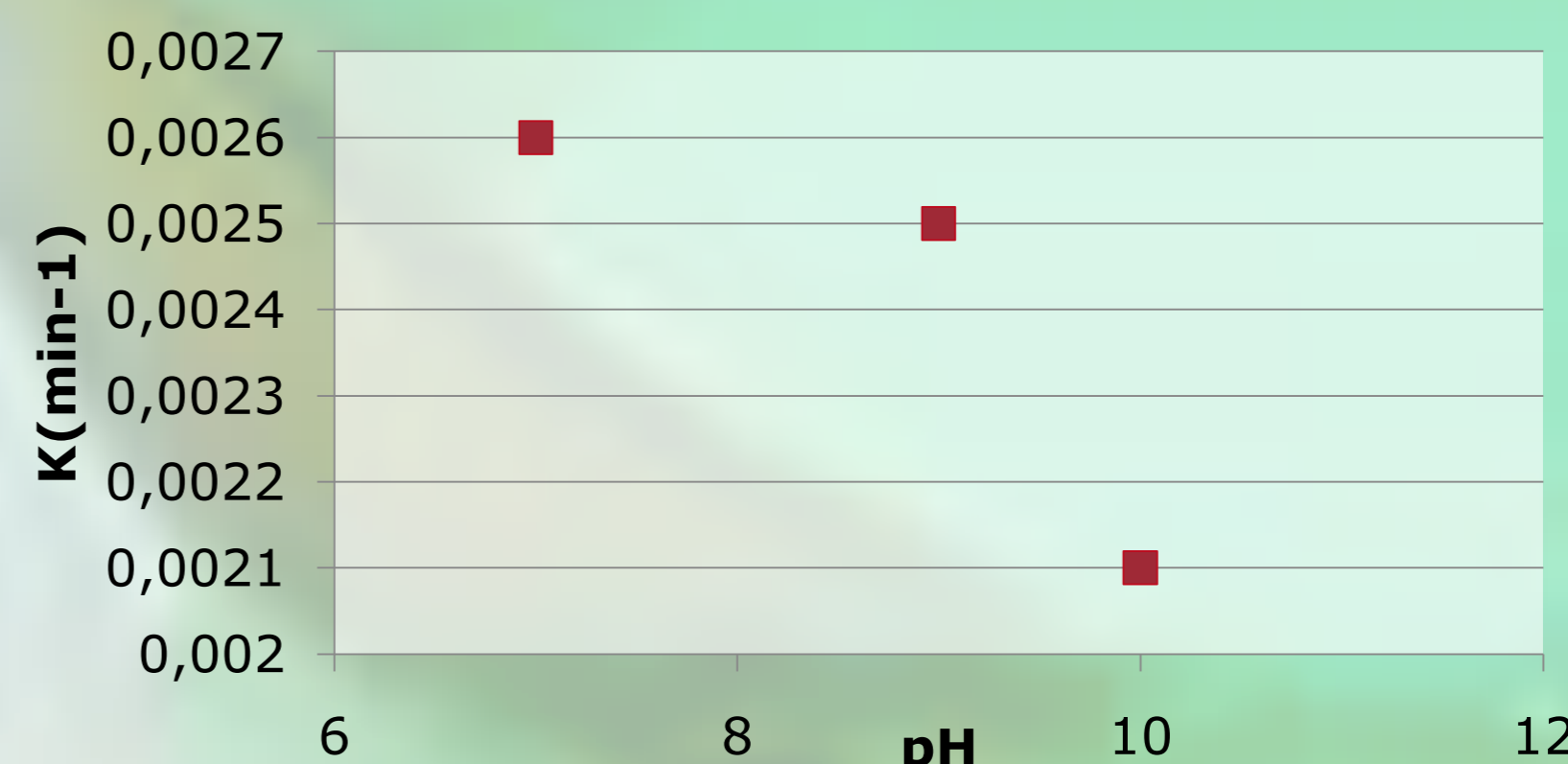


Figura 5. Determinação do pH ótimo para a degradação fotocatalítica de atorvastatina

Tabela 1. Primeiros ensaios sobre a influência da temperatura na cinética da reação.

T (K)	1/T	k(min^{-1})	ln(K)
303	0,0033	0,0044	-5,42615
293	0,003413	0,0015	-6,50229
313	0,003195	0,0016	-6,43775

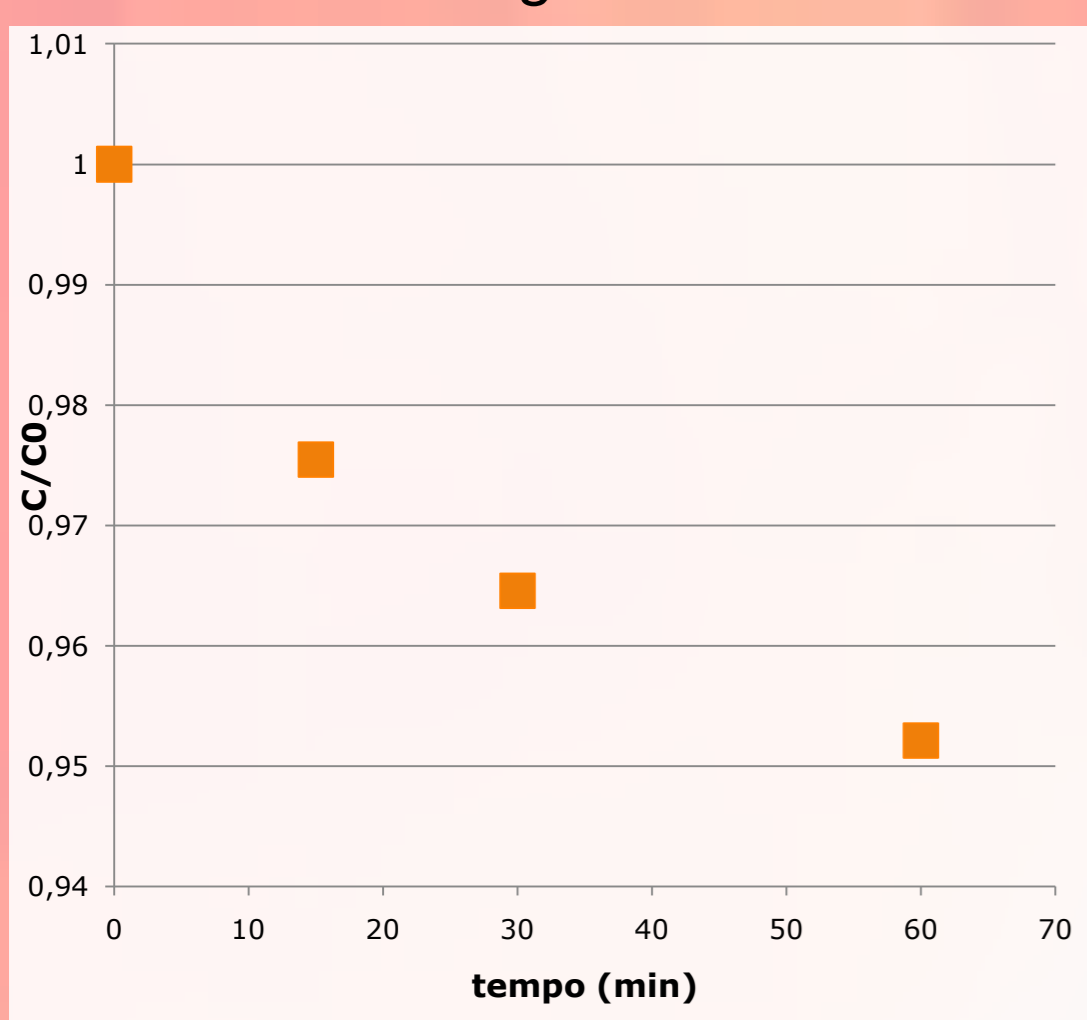


Figura 2. Curva de decaimento da atorvastatina.

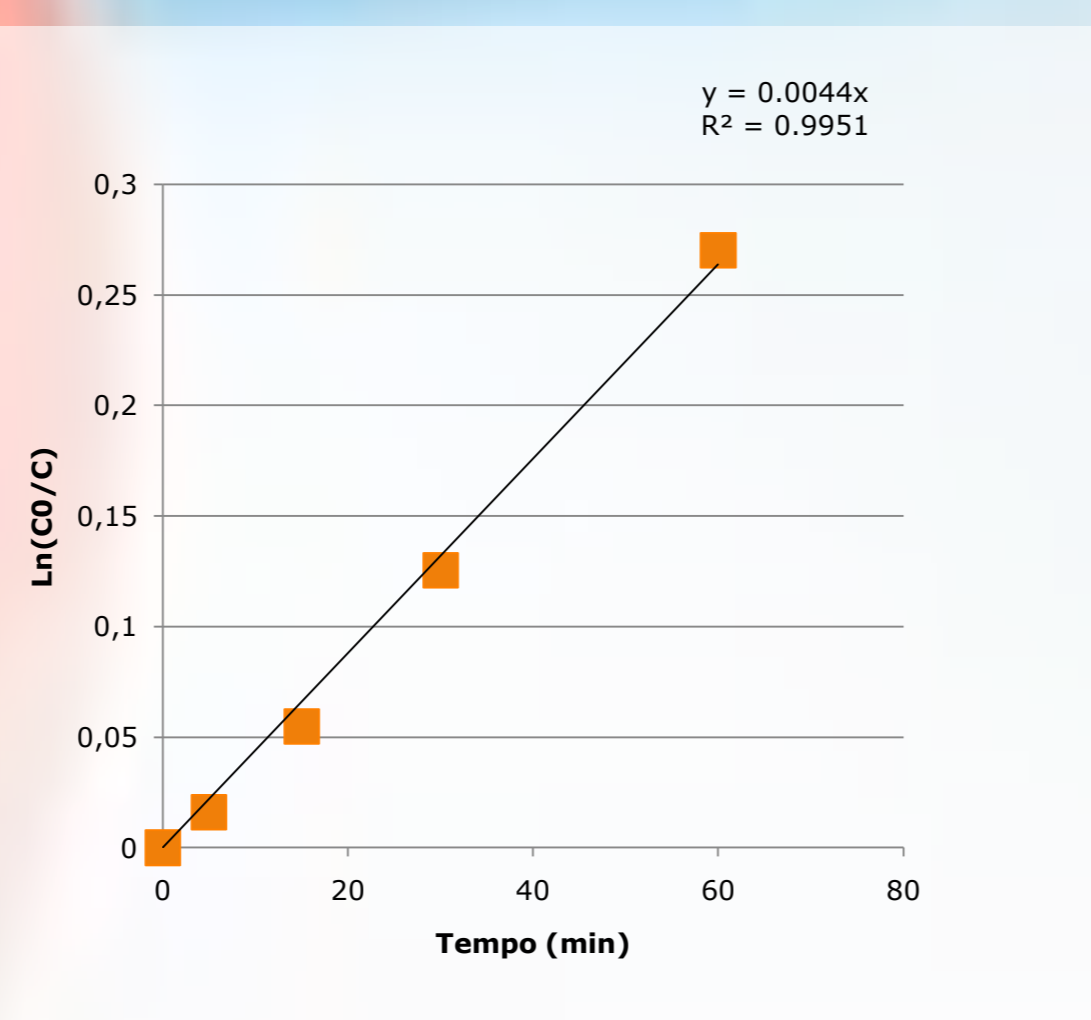


Figura 3. Cinética de pseudo-primeira ordem.

Conclusões

A reação de degradação fotocatalítica da atorvastatina cálcica segue uma cinética de pseudo primeira ordem.

Existe uma concentração ótima de substrato para a qual a reação apresenta velocidade máxima. Neste caso, esta concentração é 25 mg.L^{-1} de atorvastatina.

O pH inicial ótimo para a reação de degradação da atorvastatina cálcica é 7, coincidente com o ponto isoelétrico do TiO_2 .