

## Sessão 27

### Engenharia - Simulação e Modelagem

**257**

**UTILIZAÇÃO DE CFD PARA MODELAR OS ESTÁGIOS INICIAIS DO PROCESSO DE NANOPRECIPITAÇÃO.** *Marco Antônio Müller, Luciane da Silveira Ferreira, Jorge Otavio Trierweiler (orient.) (UFRGS).*

O objetivo do projeto consiste em desenvolver uma unidade de propósitos múltiplos para produção de nanopartículas de modo a permitir o aumento de escala de processos já desenvolvidos em bancada laboratorial. Dois grupos de técnicas têm sido reportadas para a produção de nanopartículas. A primeira envolve a polimerização de monômeros, enquanto que a segunda é baseada na dispersão de polímeros pré-formados. Neste trabalho, será utilizado o método da nanoprecipitação. Este método pode ser explicado pela turbulência interfacial e pela rápida difusão entre duas fases líquidas (orgânica e aquosa). Quando ambas as fases entram em contato, o solvente difunde rapidamente da fase orgânica para a fase aquosa e carrega consigo cadeias poliméricas em solução. Desta forma, a medida que o solvente difunde na água o polímero associado precipita formando as nanopartículas. As características das nanopartículas formadas – tamanho, potencial zeta, carga de fármaco, tendência a agregação e outras – são influenciadas diretamente pelo processo difusivo nos instantes iniciais da precipitação. Para modelar a formação das nanopartículas é necessário estudar em detalhes a difusão das fases. Para tanto, será aplicada a técnica de fluido dinâmica computacional (CFD). Através desta técnica, com escoamentos multifásicos e utilização de discretização do domínio através de malhas estruturadas e não estruturadas para os reatores, vasos e misturador, é possível analisar e comparar resultados numéricos, salvando recursos financeiros e de matéria prima. Desta forma, podemos prever o perfil de concentração das fases no reator (tanque agitado ou misturador T) para varias condições de operação e diferentes formulações. (Fapergs).