

# Degradação de fármacos mediante o uso de fotocatalise heterogênea

Cálita Elis Schweigert, Carla Sirtori

Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Instituto de Química, Av. Bento Gonçalves 9500, CEP: 91501-970, Porto Alegre, RS, Brasil

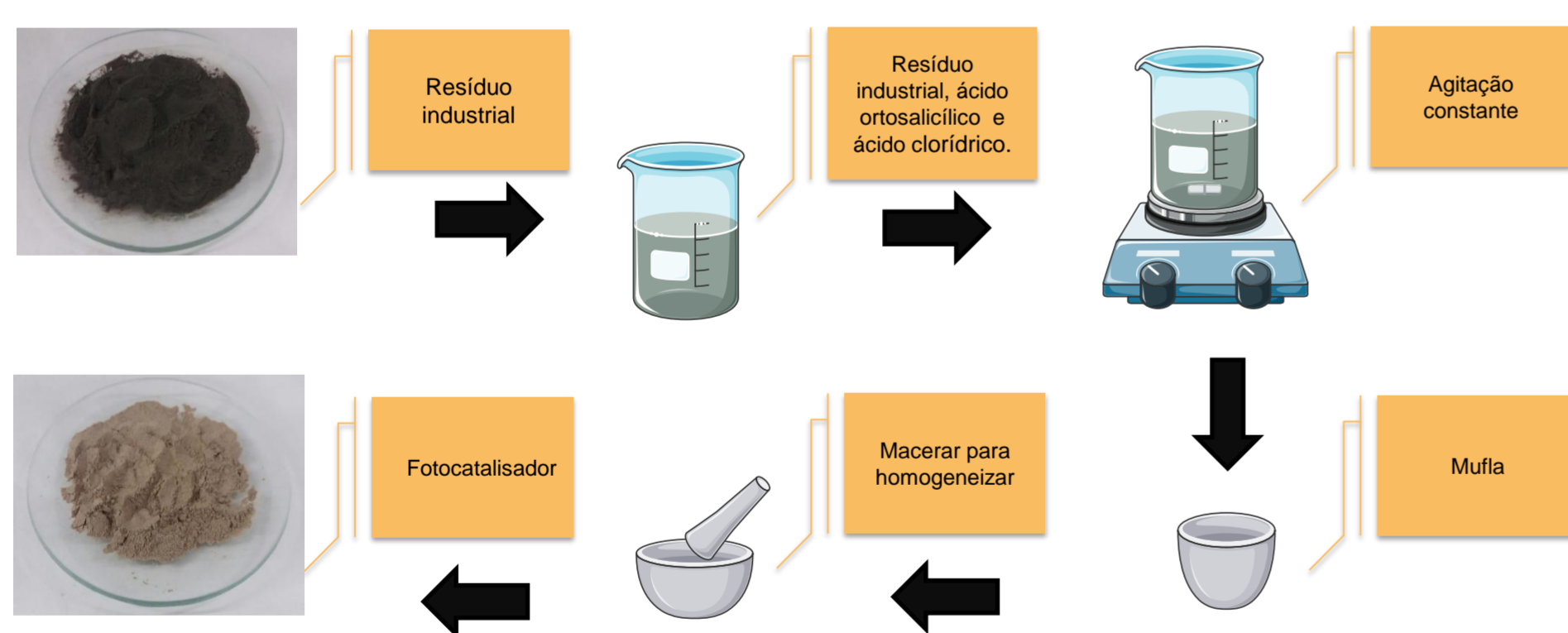
## Introdução

A fotocatalise heterogênea é um processo que consiste na geração de radicais hidroxila ( $\bullet\text{OH}$ ), espécie altamente oxidante e pouco seletiva, por meio de um fotocatalisador (semicondutor). Esse processo se encontra dentro dos processos avançados de oxidação (PAOs). No presente estudo foi avaliado a degradação de três fármacos de amplo consumo (dipirona, paracetamol e propranolol) mediante o emprego de dióxido de titânio ( $\text{TiO}_2$ ) como fotocatalisador (sintetizado a partir de um resíduo industrial, via emprego do método sol-gel [1]) em presença de luz solar.

## Metodologia

Foi realizado um planejamento Doehlert para obter a condição otimização do processo, nesse foi avaliado as variáveis massa de semicondutor e pH, a quantidade de fotocatalisador foi avaliado em cinco níveis de estudo (50; 150; 250; 350 e 450 mg) e o pH da solução, em três níveis (5; 7 e 9). Como resultados da otimização observou-se que o experimento número 5 do planejamento, o qual utilizava 350 mg de fotocatalisador em pH 5, foi o que obteve maior diminuição da área dos fármacos em estudo. No planejamento foi empregando um reator de capacidade 1L equipado com agitador magnético, a concentração inicial de cada fármaco modelo era de  $1\text{mg L}^{-1}$ . Como resposta analítica,  $A/A_0$  dos fármacos empregados foi monitorada usando técnica de UHPLC-QTOF MS. Por outro lado, foram realizados os estudos cinéticos para a condição otimizada em período de 240 minutos e a identificação de produtos de transformação gerados ao longo do processo.

## Síntese do fotocatalisador



## Resultados e discussões

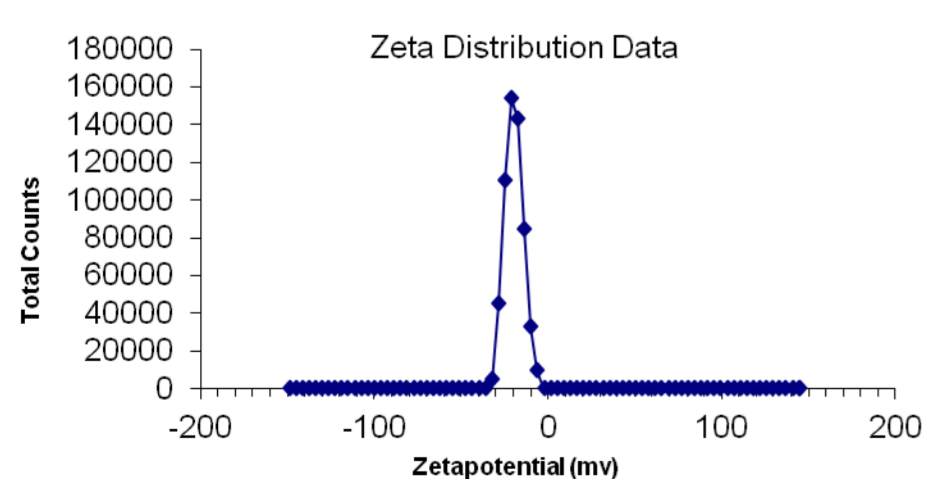


Gráfico 1: Potencial Zeta

Observando o gráfico de potencial Zeta acima percebe-se que há um perfil definido, demonstrando que o fotocatalisador é estável, bem como seu valor de carga superficial.

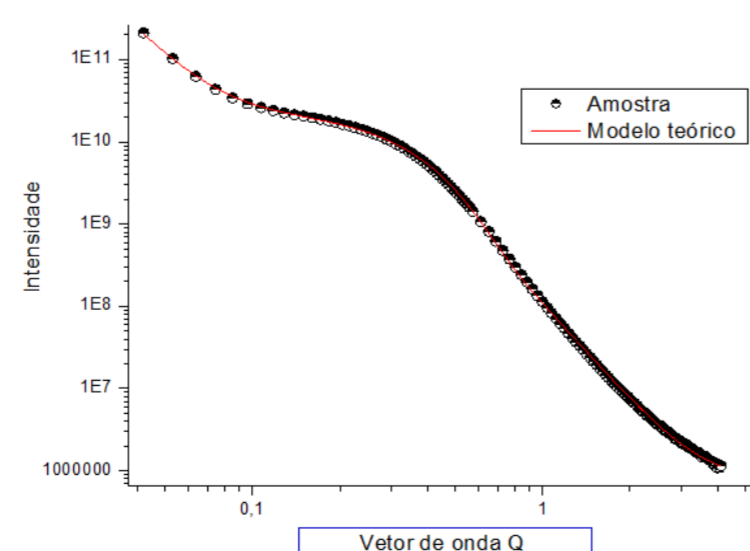


Gráfico 2: Espalhamento de raio X a baixo ângulo (SAXS)

No gráfico acima, há o modelo teórico sobreposto aos valores encontrados na leitura da amostra. Os valores obtidos se assemelham muito ao modelo, dando embasamento e segurança aos resultados.

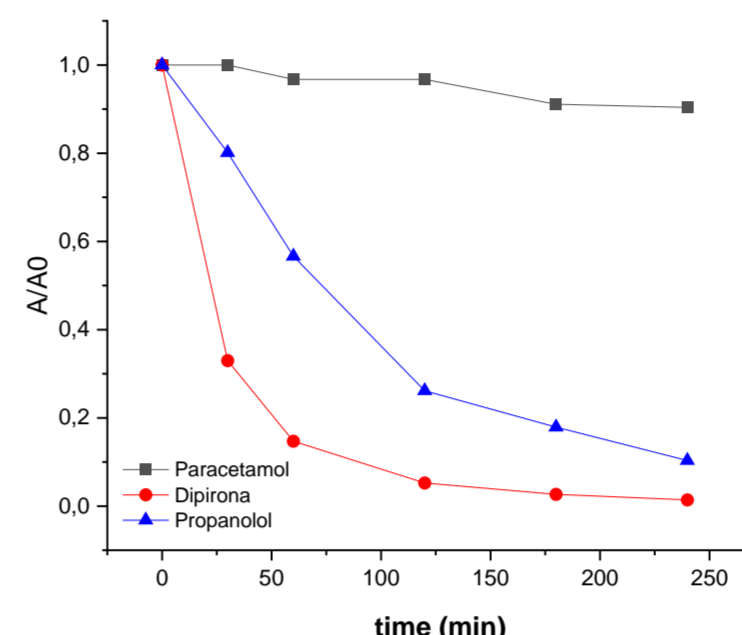


Gráfico 3: Degradação dos fármacos analisados

Na fotocatalise utilizando o fotocatalisador sintetizado obteve-se uma degradação de 9,63% paracetamol, 98,62% dipirona e 89,70% propranolol.

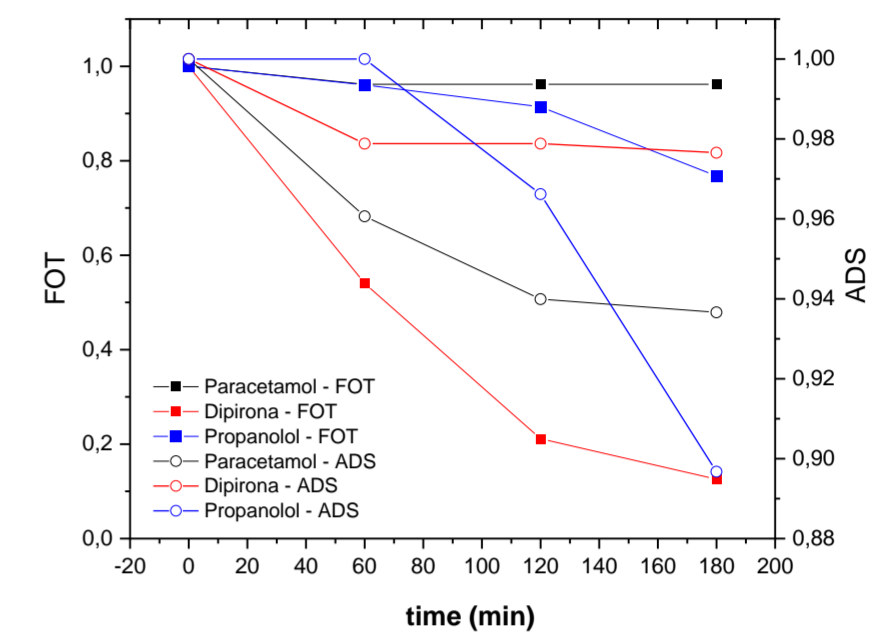


Gráfico 4: Comparativo da fotólise com a adsorção

Nos estudos comparativos entre a adsorção, degradação via fotólise e via catálise heterogênea tem-se os gráficos a seguir que indicam que a degradação via fotocatalise foi mais eficiente no caso dos três fármacos.

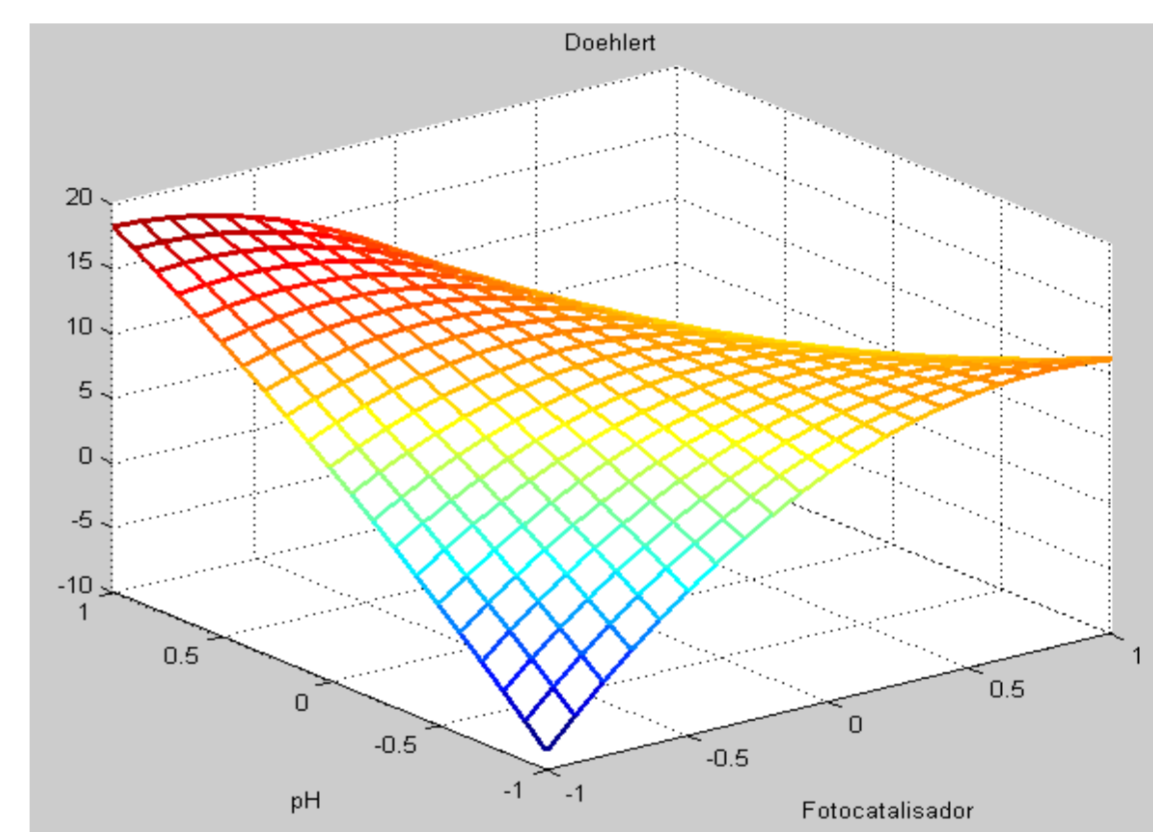


Gráfico 5: Superfície de resposta

No gráfico 5 pode-se observar o modelo de superfície de resposta obtido pelos resultados do planejamento Doehlert, onde é relacionado os diferentes níveis de pH e as diferentes massas do fotocatalisador empregadas. Dita superfície pode ser explicada na seguinte equação:

$$Y = 11.02 + 1.713 \cdot x_1 - 1.805 \cdot x_2 - 11.65 \cdot x_1 \cdot x_2 - 1.651 \cdot x_1^2 - 6.408 \cdot x_2^2$$

## Conclusões

Conseguiu-se sintetizar e avaliar o potencial de degradação do fotocatalisador obtido a partir do resíduo industrial. O planejamento Doehlert e superfície de resposta foram ferramentas empregadas para otimizar as condições experimentais obtendo porcentagens maiores a 89% para dipirona e propranolol. Adicional foi identificado um total de 10 produtos de transformação, três da dipirona e sete do propranolol, no caso do paracetamol não foi identificado nenhum produto de transformação devido ao fato da baixa degradação obtida deste (9,63%).

## Agradecimentos

Ao CNPq pela Bolsa de IC, ao Prof. João Henrique Zimnoch dos Santos e à Profa. Nádyá P. da Silveira e seu grupo.

## Referências

[1] Brinker, C. J; Scherrer, G. W., Sol Gel Science. Academic Press: Boston, 1990, 1a ed.