

O USO DE FOTOCATÁLISE PARA DEGRADAÇÃO DA SERTRALINA

Caroline Piza Maldini^{1*},

Ailton J. Moreira^{2*},

Gian P. G. Freschi^{3*}

Química Ambiental

RESUMO

Neste trabalho, ensaios fotocatalíticos foram realizados em soluções de sertralina com concentrações 10 mgL^{-1} , sob a radiação ultravioleta (UV). O monitoramento da degradação da sertralina foi realizado por meio de cromatografia líquida de alta eficiência. Degradações de sertralina de 51% (UV 120 min), 74% (TiO_2 /UV 120 min), 75% (TiO_2 - Mn/UV 120 min), e de 83% (TiO_2 - B/UV 120 min) foram observadas para soluções de sertralina 10 mgL^{-1} , evidenciando maior eficiência no processo de degradação, para a associação de energia UV e catalisador TiO_2 dopado com Boro. Os resultados obtidos neste estudo permitiram verificar que a aplicação do processo de fotocatalise pode ser de grande importância nos processos de tratamento de efluentes e que a inserção de agentes dopantes pode tornar os semicondutores mais ativos em processos de fotocatalise.

Palavras-chave: Ultravioleta; Fármaco; Semicondutor.

^{(1)*} Estudante; carolinepizamaldi@gmail.com ; ^{(2)*} Estudante; aijomoquim@hotmail.com ;

^{(3)*} Pesquisador; gianpgfreschi@gmail.com.

* Universidade Federal de Alfenas – ICT – Campus Poços de Caldas - MG

INTRODUÇÃO

Estudos têm sido realizados e revelam a presença de resíduos de fármacos em várias partes do mundo. Evidentemente, a preocupação a respeito da contaminação e, conseqüentemente, da qualidade da água no Brasil ainda está focada no tratamento de esgotos domésticos que, ainda é deficitário. (MELO et al, 2009).

A principal rota de entrada de resíduos de fármacos no ambiente é o lançamento de esgotos domésticos, tratados ou não, em cursos de água. No entanto, também devem ser considerados os efluentes de indústrias farmacêuticas, efluentes rurais, a presença de fármacos no esterco animal utilizado para adubação de solos e a disposição inadequada de fármacos após expiração do prazo de validade. (MELO et al, 2009).

Os processos oxidativos avançados (POA) têm sido extensivamente estudados devido ao seu potencial como alternativas ou complementos aos processos convencionais de tratamento de efluentes. (MELO et al, 2009, MOREIRA et al., 2017).

A radiação ultravioleta é muito energética e pode propiciar a clivagem de muitas ligações químicas, ocorrendo a degradação da molécula. (SILVA et al, 2009, MOREIRA et al., 2016).

Objetiva-se com esse trabalho o estudo da eficiência da degradação do fármaco sertralina por meio de fotocatalise com combinação de radiação UV e semicondutores TiO_2 , $\text{TiO}_2 - \text{Mn}$ e $\text{TiO}_2 - \text{B}$.

METODOLOGIA

Soluções padrão (estoque) 1000 mgL^{-1} de Sertralina (SRTL) são preparadas por meio da dissolução do respectivo sal 98,49% em Metanol grau HPLC.

O método de síntese do semicondutor de TiO_2 consistiu em dispersar os 12,6 mL de tetraisopropóxido de titânio em 60 mL de solução de isopropanol 20% (v v^{-1}) em béquer de vidro de 250 mL. A mistura foi agitada durante 1 h com agitação magnética. Após agitação, as amostras foram submetidas a aquecimento no microondas (CEM, Matthews, NC, EUA), aplicando, no decorrer do tempo, aquecimento crescente.

Após o aquecimento, as amostras foram resfriadas e submetidas a centrifugação por 10 min à 3200 rpm. Este procedimento é realizado 3 vezes, o precipitado é lavado com metanol e recolhido em béquer de vidro de 200 mL. Subsequentemente, as amostras são submetidas à calcinação em um forno de mufla FI 1200 (CEVIPLA, São Carlos, SP, Brasil), aumentando a temperatura no decorrer do tempo, permanecendo por fim, a $600 \text{ }^\circ\text{C}$ por 2 horas.

O processo de síntese das amostras contendo o Mn e B como dopantes foi idêntico ao processo descrito acima, sendo que acetato de manganês tetra hidratado e ácido bórico foram adicionados ao sistema.

Acetonitrila e metanol, grau HPLC (JT Backer) foram utilizados na preparação de soluções e processos ligados à análise cromatográfica. Solução SRTL 10.0 mg L^{-1} foi preparada a partir da solução estoque para execução dos ensaios fotocatalíticos.

Estudos fotocatalíticos na região UV foram realizadas um reator de madeira, com dimensões internas de 45cm (comprimento) x 20cm (largura) x 28cm (altura) e 23cm de altura entre a lâmpada e a solução a ser irradiada. Além disso, o sistema consistia em 4 lâmpadas de mercúrio de baixa pressão Philips TUV 15W / G15T8 - Long Life - UV - C ($\lambda_{\text{max}} = 254 \text{ nm}$), 1 Cooler Axial AC FAN Modelo FZY8038 MBL.

As soluções foram agitadas por agitador magnético dentro do reator.

Análises cromatográficas foram realizadas em HPLCAgilent 1220 Infinity LC, UV / Vis (225nm) e uma coluna Zorbax Eclipse Plus C18, 4.6 X 250mm, 5µm. O tratamento dos dados cromatográficos foram executados através do software EZChrom Agilent OpenLAB Chromatography Data System (CDS) EZChrom.

A **Figura 1** apresenta o fluxograma experimental para execução dos processos.

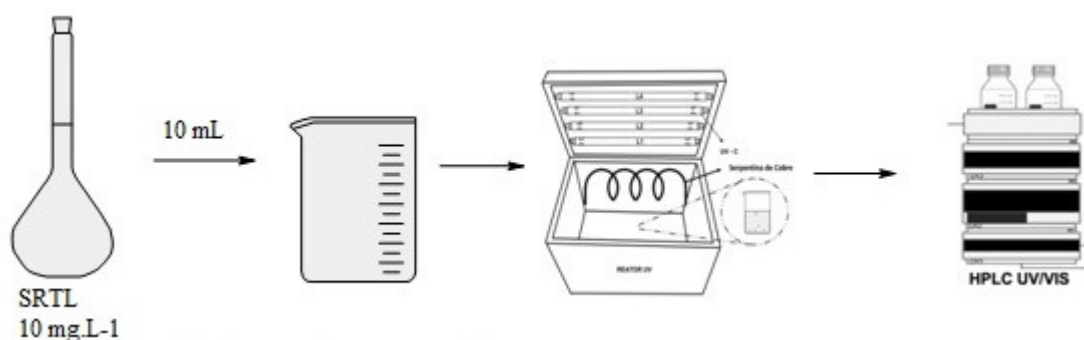


Figura 1. Fluxograma experimental para degradação UV da sertralina.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A degradação da SRTL pode ser avaliada por meio de processos fotocatalíticos que no presente estudo se dá pela combinação de radiação UV e semicondutores TiO_2 puro, TiO_2 dopado com 1%B e TiO_2 dopado com 1%Mn, (obtidos através de método de síntese hidrotermal assistido por micro-ondas, e 100% constituídos da fase anatase).

Para esse estudo submeteu-se uma amostra de 10 mg.L^{-1} a ensaio fotocatalítico em radiação UV para usar de comparativo às amostras submetidas a ensaios fotocatalíticos.

A **Figura 2** ilustra o comportamento de degradação da SRTL quando submetidos a fotocatalise UV por período de até 120 minutos de exposição.

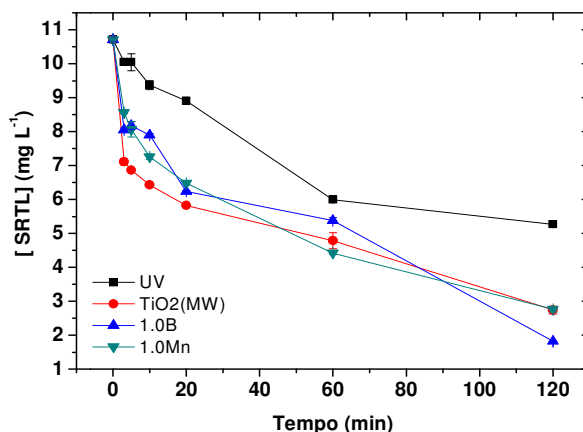


Figura 2. Degradação fotocatalítica UV da SRTL.

Evidencia-se que a inserção dos semicondutores exerce influência positiva junto a degradação da SRTL, sendo que taxas de remoção da ordem de 51% (fotólise), 74% (TiO₂), 75% (TiO₂1%Mn) e 83% (TiO₂1%B) são verificados para irradiação das soluções no tempo de 120 minutos. Obviamente que, durante a aplicação de processos fotocatalíticos, adsorção junto a superfície do semicondutor pode ser constatada, porém, sendo a interação analito/semicondutor, essencial para que os processos fotocatalíticos sejam efetivos, conclui-se que as etapas de adsorção são importantes e desejáveis.

A determinação de constante cinética de pseudo primeira ordem são aplicadas, a fim de se avaliar melhor a eficiência da degradação da SRTL e os dados podem ser verificados através da **Figura 3**.

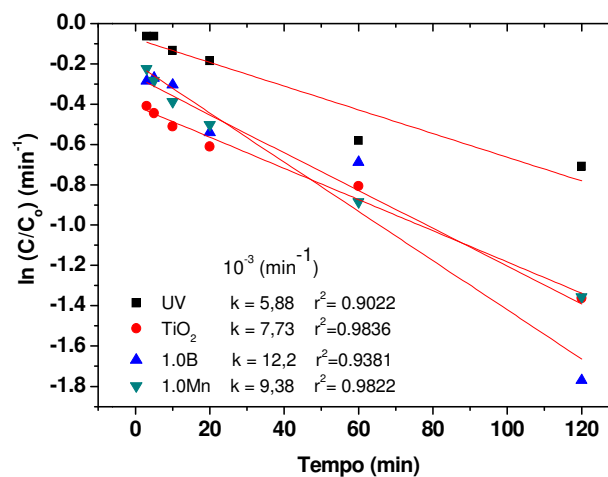


Figura 3. Gráfico de cinética de pseudo primeira ordem obtido durante a degradação fotolítica e fotocatalítica da SRTL.

Através dos valores de constantes cinéticas obtidos para aos diferentes processos de degradação (**Figura 3**), observa-se em comparação ao processo fotolítico, um aumento de 31% (TiO₂), 60% (TiO₂ 1%Mn) e 107% (TiO₂ 1%B) para os processos fotocatalíticos. Importante destacar ainda que, para todos os processos, a correlação linear para o intervalo de tempo aplicado (5 a 120 minutos) apresenta valores confiáveis, sendo a média geral correspondente a $r^2 = 0,9602 \pm 0,0312$.

Deste modo, é importante destacar que, a aplicação dos semicondutores em processos avançados de oxidação apresentou efetiva ação, junto a degradação da SRTL, sendo que a inserção dos agentes dopantes foi capaz de otimizar ainda mais os processos, uma vez que estes permitem diferentes interações entre o semicondutor e a radiação eletromagnética, tornando o processo mais eficiente.

CONCLUSÕES

O presente trabalho demonstrou dados evidentes que a fotocatalise apresenta êxito na degradação da Sertralina. Para a amostra (10 mg L^{-1} e $\text{pH}_0 = 6,9$) de fotólise na radiação UVem 120 minutos, a taxa de remoção foi de 51%.

Com o uso de semicondutor TiO_2 puro essa taxa tem um aumento para 74%, com a utilização de semicondutores dopados o processo é otimizado, como pode ser percebido para os semicondutores $\text{TiO}_2 - 1\% \text{Mn}$ e $\text{TiO}_2 - 1\% \text{B}$, com taxas de remoção 75% e 83% respectivamente.

No estudo de cinética vê-se um aumento da constante cinética, sendo para $\text{TiO}_2 - 1\% \text{B}$ o maior valor, $k = 12,2 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}$, entende-se que a degradação da Sertralina seja mais eficaz para esse semicondutor visto que a velocidade de reação é maior.

Conclui-se que a remoção da SRTL pode ser otimizada sendo, importante o estudo de processos fotocatalíticos para a remoção de compostos persistentes.

REFERÊNCIAS

MELO, S.A.S.; TROVÓ, A.G.; BAUTITZ, I.R.; NOGUEIRA, R.F.P. Degradação de fármacos residuais por processos oxidativos avançados. **Química Nova**. Sociedade Brasileira de Química, v. 32, n. 1, p. 188-197, 2009.

MOREIRA, A.J., BORGES, A.C., GOUVEA, L.F.C., MACLEOD, T.C.O., FRESCHI, G.P.G.. The process of atrazine degradation, its mechanism, and the formation of metabolites using UV and UV/MW photolysis. **Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry**. 347 (2017) 160–167

SILVA, K.E.R. DA.; ALVES, L.D.S.; SOARES, M.F. DE LA ROCA.; PASSOS, R.C.S.; FARIA, A.R.; NETO, P.J.R. Modelos de avaliação da estabilidade de fármacos e medicamentos para a indústria farmacêutica. **Revista de ciências farmacêuticas básica e aplicada**, v. 30, n. 2, p. 129-135, 2009.