

# ESTUDO DA DEGRADAÇÃO DA SERTRALINA ATRAVÉS DOS PROCESSOS FOTOLÍTICOS UV

Ailton J. Moreira<sup>1</sup>

Caroline Piza Maldini<sup>2</sup>

Lucimara Mendonça Costa<sup>3</sup>

Gian P. G. Freschi<sup>4</sup>

## Química Ambiental

### RESUMO

Solução de Sertralina (SRTL) foi submetida a ensaios fotolíticos na região do ultravioleta-visível. Os espectros eletromagnéticos do fotorreator foram identificados e quantificados através de um espectrorradiômetro (operando na região entre 230 e 900nm). Determinados os espectros eletromagnéticos, o fotorreator foi aplicado para degradação fotolítica da SRTL, e após 120 minutos de irradiação, remoção 51% foi observada. As amostras degradadas foram analisadas através de cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE) e desprotonação do fármaco foi confirmada através do aumento da acidez da solução após irradiação. Por fim, o monitoramento da SRTL e variação de pH no sistema, permitem sugerir um mecanismo de degradação do composto original, processo de grande importância para compreensão do comportamento do respectivo fármaco frente aos processos oxidativos avançados.

**Palavras-chave:** Fármaco; Fotólise; Processos Avançados Oxidativos (POAs).

<sup>1</sup> *Doutorando em Química Analítica; Instituto de Química – UNIFAL -MG- aijomoquim@gmail.com.*

<sup>2</sup> *Estudante Bacharel em Ciência e Tecnologia; Instituto de Ciência de Tecnologia – UNIFAL-MG - carolinepizamaldi@gmail.com*

<sup>3</sup> *Doutoranda em Química Analítica; Instituto de Química – UNIFAL -MG- lucimaramendos@yahoo.com.br*

<sup>4</sup> *Prof. Dr. Gian Paulo Giovanni Freschi, Instituto de Química – UNIFAL -MG- gianpgfreschi@gmail.com*

## INTRODUÇÃO

A contaminação ambiental por fármacos tem sido muito investigada pela comunidade científica, já que muitos princípios ativos de medicamento vêm sendo encontrados nos mais diversos ecossistemas terrestres, e em concentrações que variam da ordem de  $\text{ng.L}^{-1}$  a  $\text{mg.L}^{-1}$  (GRABICOVA et al. 2015, KOSTICH et al. 2014). Estudos demonstram que esses fármacos e, seus metabólitos, estão presentes em ambientes aquáticos em várias partes do mundo, como Alemanha, Brasil, Canadá, Holanda, dentre outros países (HUERTA et al. 2012). A ocorrência desses fármacos residuais em águas superficiais e de subsolo demonstra uma necessidade de estudos que determinem os efeitos tóxicos desses fármacos frente ao meio ambiente. Segundo ADAMS E BERGOLD, 2001, a Sertralina é mais utilizada em pessoas idosas devido à baixa interação com outros medicamentos. Este fármaco é considerado um

contaminante emergente, uma vez que apresenta baixa taxa de degradação ambiental e remoção pelos processos de tratamento convencionais.

Um dos sistemas utilizados no tratamento de efluentes é denominado Processos Oxidativos Avançados (POAs) que podem ser utilizados para a destruição oxidativa de poluentes orgânicos (p. ex.: herbicidas, fungicidas e fármacos) e inorgânicos (p. ex.:  $\text{SO}_3^-$ ,  $\text{HS}^-$ ,  $\text{PO}_3^-$  e  $\text{NH}_4^+$ ). A maioria usa a combinação de fortes espécies oxidantes ( $\text{O}_3$  e  $\text{H}_2\text{O}_2$ ) com catalisadores (metais de transição ou fotocatalisadores) e/ou irradiação (p. ex.: ultravioleta (UV), ultra-som ou feixe de elétrons) permitindo, desta forma, a otimização dos processos já existentes e aplicação destes para uma diversidade maior de poluentes emergentes (DALMÁZIO, 2007). Desta forma, o objetivo deste trabalho é avaliar o potencial de degradação fotolítico e fotocatalítico da sertralina, sob exposição a radiação ultravioleta, aplicando-se variação de alguns parâmetros físico-químicos para otimização do sistema de degradação.

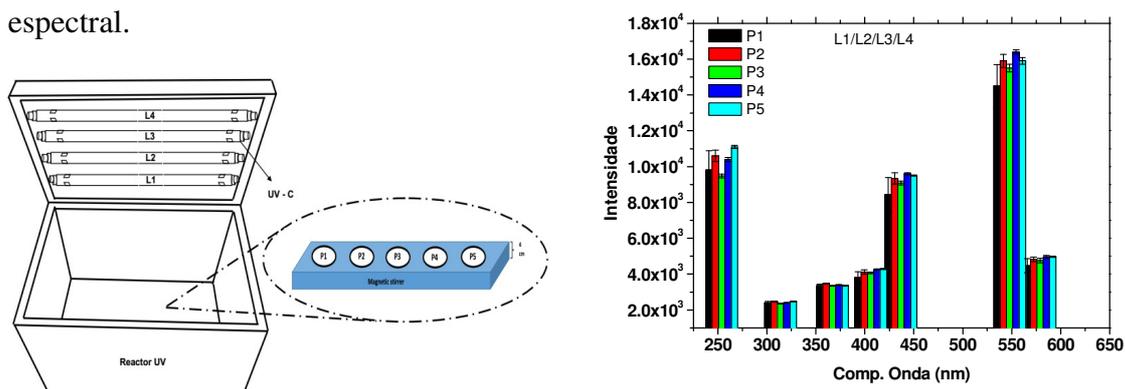
## METODOLOGIA

Reator UV foi caracterizado através de medidas de seus espectros de emissão e intensidade luminosa, sendo nesta etapa, utilizado um Luxímetro e um espectrorradiômetro.

Os estudos de degradação da STRL foram conduzidos no reator UV, sendo utilizados 10 mL de solução de STRL na concentração de  $50 \text{ mg.L}^{-1}$  com ajustes de pH de 5,3-6,9 e 8,8, e submetido a irradiação no intervalo de tempo de 5 até 120 min. Após irradiadas,  $30 \mu\text{L}$  das soluções foram submetidas à análise cromatográfica, e o pH final, monitorado através de potenciometria com eletrodo de membrana de vidro.

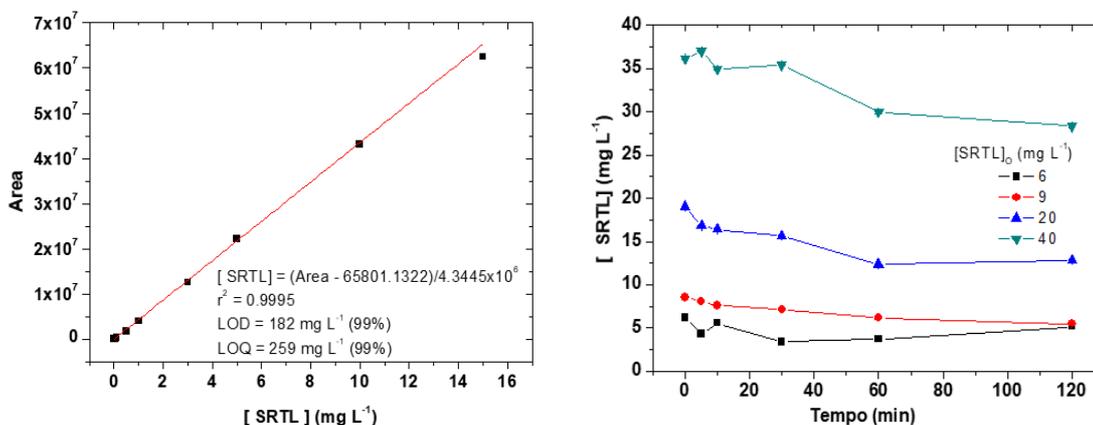
## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A caracterização do fotorreator, permitiu identificar que, para diferentes posições (**Figura 1**) as intensidades de emissão são distintas nos diferentes comprimentos de onda, sendo ainda que, a região mais energética (254 nm), apresenta a maior intensidade de emissão espectral.



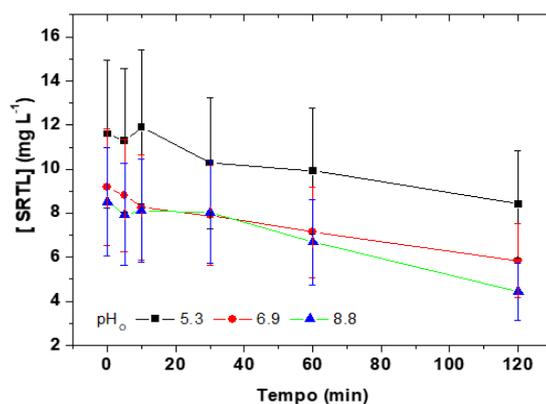
**Figura 1:** Fotorreator UV e espectros de emissão.

Antes dos ensaios de degradação da STRL, a curva de calibração (5,0 a 50,0 mg.L<sup>-1</sup>) foi executada para a quantificação do fármaco sendo verificada boa linearidade para STRL, conforme ilustrado na **Figura 2**. Em seguida, foi realizado o estudo de influência da concentração inicial da STRL frente a degradação fotolítica, conforme apresentada na **Figura 3**, evidenciando que a concentração inicial da STRL não exerce influência significativa junto ao processo fotolítico.



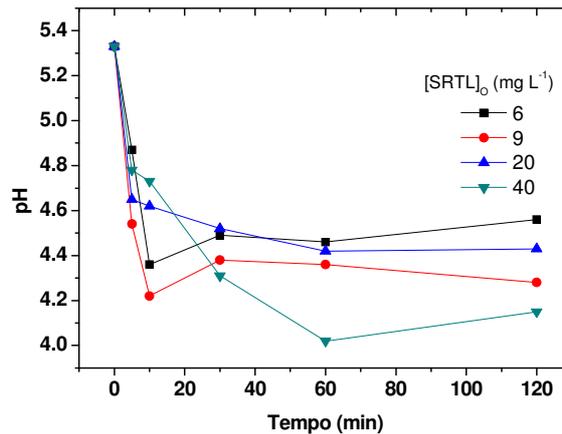
**Figura 2:** Curva de calibração para a STRL. **Figura 3:** Influência da concentração inicial de Sertralina.

Para melhor compreensão dos processos de degradação da STRL através do processo fotolítico, foi realizado o estudo da influência do pH inicial, conforme mostra a **Figura 4**. Desta forma, percebe-se que para o pH = 8, a degradação da solução de STRL 10 mg.L<sup>-1</sup> apresenta percentual máximo de degradação (48%) no tempo de 120 min de exposição à radiação UV.



**Figura 4:** Estudo de influência do pH inicial.

Avaliando os dados apresentados através da **Figura 5**, foi comprovado um aumento na acidez da solução após o processo de degradação da SRTL confirmando que uma das etapas de degradação pode ser atribuída a desprotonação do grupo amina presente na estrutura molecular do respectivo fármaco.



**Figura 5:** Variação do pH após fotodegradação da SRTL.

Importante destacar que, a entalpia de ligação C-N (presente na estrutura da SRTL) apresenta um valor de  $276 \text{ kJ.mol}^{-1}$ , e esta entalpia de ligação é a menor verificada para as ligações presentes na respectiva molécula (C-H, C-C, N-H, C=C, C-Cl). Assim, o aumento da acidez pode estar diretamente relacionado ao rompimento da ligação C-N durante o processo de degradação, o que permite iniciar uma discussão inicial sobre as etapas de degradação da SRTL mediada por fotólise UV.

## CONCLUSÕES

O presente trabalho demonstrou que o fotorreator apresenta diferentes espectros de emissão, e que, sendo a banda de 254 nm a mais energética, esta possui maior influência no processo de fotólise UV. As taxas de remoção da ordem de 51% quando submetida a intervalo de tempo de irradiação de 120 minutos em condições otimizadas de concentração e pH (10  $\text{mg.L}^{-1}$  e  $\text{pH}_0 = 6,9$ ) foi acompanhada através de análises cromatográficas e, constatada uma etapa de desprotonação (aumento da acidez do meio), uma possível etapa de degradação da SRTL que pode ser sugerida.

## REFERÊNCIAS

ADAMS, A.I.H.; BERGOLD, A.M. Doseamento do cloridrato de sertralina por cromatografia líquida de alta eficiência e volumetria em meio não-aquoso. **Brazilian Journal of Pharmaceutical Sciences**, v. 37, n. 3, 2001.

ARAÚJO, K.S.; ANTONELLI, R.; GAYDECZKA, B.; GRANATO, A.C.; MALPASS, G.R.P. Processos oxidativos avançados: uma revisão de fundamentos e aplicações no tratamento de águas residuais urbanas e efluentes industriais. **Revista Ambiente & Água**, v.11, p. 387-401, 2016.

DALMAZIO, I. Aplicação da espectrometria de massas com ionização electrospray no monitoramento de processos oxidativos avançados de interesse ambiental: degradação de fármacos, avaliação de sistemas oxidativos e oxidação do isopreno. 2007.

DOS SANTOS, J.H.Z.; PIZZOLATO, T.M.; DA CUNHA, A.C.B. Desenvolvimento de metodologia analítica para quantificação de fármacos em meio aquático por extração em fase sólida e HPLC. **Rev. de ciências ambientais**, v. 1, n. 2, p. 19-34, 2007.

DOS SANTOS, M.C. et al. Utilização de fotocatalise heterogênea para a degradação de contaminantes emergentes: cloridrato de norfloxacino, 2017.

JUNIOR, I. L. C.; PLETSCHE, A. L.; TORRES, Y. R. Ocorrência de Fármacos Antidepressivos no Meio Ambiente-Revisão. **Revista Virtual de Química**, v. 6, n. 5, p. 1408-1431, 2014.

MORENO, R. A.; MORENO, D. H.; SOARES, M. B. M. Psicofarmacologia de antidepressivos. **Revista Brasileira de Psiquiatria**, v. 21, p. 24-40, 1999.

MOREIRA, A.J., PINHEIRO, B.S., ARAÚJO, A.F., FRESCHI, G.P.G. Evaluation of atrazine degradation applied to different energy systems. **Environ. Sci. Pollut. Res.**, v.23, p. 18502-18511.

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**. v. 347, p. 160–167, 2017.

PIGNATELLO, J. J.; OLIVEROS, S. E.; MACKAY, A. Advanced oxidation processes of organic contaminant destruction based on the Fenton reaction and related chemistry. **Critical Reviews in Environmental Science and Technology**, v. 36, p. 1-84, 2006.

SILVA, K. E.R. et al. 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.