

**ÁREA DE PESQUISA: Termodinâmica e Processos de Separação**

**DOCENTE ORIENTADOR: André Bernardo**

**TÍTULO: Cristalização de moléculas complexas**

**RESUMO**

A Cristalização é a operação predominante na formação de partículas sólidas nas indústrias química e farmacêutica. Estima-se que 70% de todo material sólido – e 90% dos princípios ativos farmacêuticos – seja produzido por cristalização. Especificamente nas indústrias de química fina e farmacêutica, emprega-se extensivamente a cristalização por adição de antissolvente, pois é comum que o soluto seja muito solúvel no solvente original ou instável em temperaturas mais altas.

Neste contexto, o objetivo deste trabalho é estimar parâmetros cinéticos da cristalização, nucleação, crescimento e aglomeração, levando em conta fenômenos secundários como a transição de polimorfos ou solvatomorfos. A estimativa é feita em ensaios de batelada alimentada nos quais são monitoradas propriedades da solução – temperatura e índice de refração – e dos cristais – turbidez e/ou distribuição de comprimento de corda.

Os parâmetros cinéticos estimados serão validados em ensaios adicionais de cristalização, e posteriormente utilizados na produção de cristais com qualidade otimizada.

**Palavras-chaves:** cristalização; fármacos; aminoácidos.

**ÁREA DE PESQUISA: Termodinâmica e Processos de Separação**

**DOCENTE ORIENTADOR: André Bernardo**

**TÍTULO: Determinação dos equilíbrios sólido-líquido e líquido vapor de moléculas complexas**

**RESUMO**

Moléculas utilizadas como ingredientes farmacêuticos ativos (IFA) e aminoácidos têm uma complexidade estrutural que levam à alta probabilidade de ocorrência de fenômenos como o polimorfismo e o solvatomorfismo. Tais fenômenos podem ter impacto comercial – como na proteção de patentes e no tempo de prateleira – e farmacológicos – como a biodisponibilidade de medicamentos.

Neste contexto, este trabalho propõe a determinação do equilíbrio sólido-líquido IFA em mistura de solventes de grau farmacológico e alimentício (água-etanol e água-propileno glicol), e em diferentes temperaturas, e o ajuste desses dados experimentais com diferentes modelos termodinâmicos. As medidas serão feitas, em princípio, pelo método isotérmico.

Como a utilização de solventes orgânicos impõe a produção de um efluente também complexo, o efeito desses solutos no equilíbrio líquido-vapor na mistura será estudado por meio de medidas de ebuliometria, e o ajuste dos resultados por diferentes modelos termodinâmicos.

**Palavras-chaves:** solubilidade; equilíbrio líquido-vapor; fármacos; aminoácidos.

**ÁREA DE PESQUISA: Termodinâmica e Processos de Separação**

**DOCENTE ORIENTADOR: André Bernardo**

**TÍTULO: Síntese e caracterização de materiais adsorventes provenientes de biomassa vegetal para remoção de fármacos em meio aquoso**

**RESUMO**

No Brasil, ainda há um grande déficit no saneamento básico e os despejos não tratados corretamente podem gerar uma série de problemas ambientais, além da questão envolvendo a saúde da população. Dentre estes poluentes, pode-se destacar os fármacos. A dipirona e o paracetamol (analgésicos), o diclofenaco e o ibuprofeno (anti-inflamatórios) são fármacos utilizados em larga escala no Brasil e podem ser adquiridos facilmente em farmácias. Devido ao grande uso e posterior descarga no ambiente aquático há a necessidade de se desenvolver processos alternativos/complementares que sejam eficientes e economicamente viáveis. Dentre as estratégias em estudo, as baseadas no uso de materiais adsorventes são viáveis, principalmente pela sua compatibilidade com os sistemas de tratamento já existentes, principalmente aquelas provenientes de fontes renováveis de biomassa que envolvem a recuperação de resíduos sem valor agregado acrescentando-os para integração nos ciclos de produção e dinamização da bioeconomia, tornando-se assim uma proposta atrativa.

Nesse contexto, propõe-se a obtenção de materiais adsorventes por meio de bagaço de cana *in natura* e processado (cinzas e biocarvão) visando remover efetivamente as moléculas de fármacos paracetamol e ibuprofeno do meio aquoso. Inicialmente pretende-se trabalhar o processo de forma batelada até que seja possível a implementação de um leito poroso onde possa ser averiguada a saturação do processo e conseqüentemente o ponto de ruptura. Como biomassa, o bagaço de cana é um resíduo com pouco valor agregado, podendo ser um atrativo para tornar a proposta viável, por aumentar o apelo econômico e ambiental.

**Palavras-chaves:** adsorção; fármacos; biomassa; poluição da água.