

Estudo de partição de diclofenaco de sódio em Sistemas Aquosos Bifásicos

Larissa S.S. Araujo^{1*}(IC), Jussara A. Penido¹(IC), Roberta A. Carvalho¹(PG),
Leandro R. de Lemos²(PQ), Guilherme D. Rodrigues³ (PQ), Aparecida B. Mageste¹ (PQ).
larissa.qui@gmail.com

¹Universidade Federal de Ouro Preto, ² Universidade Federal dos Vales Do Jequitinhonha e Mucuri, ³ Universidade Federal de Minas Gerais

Palavras Chave: Diclofenaco de sódio, Sistema Aquoso Bifásico

Abstract

Study of Sodium Diclofenac Partitioning in Aqueous Two-Phase System

In this study, the application and optimization of Aqueous Two-Phase System for the Sodium Diclofenac partitioning were investigated. The best partition coefficient was obtained for the higher TLL of the most hydrophobic polymers.

Introdução

O Diclofenaco de Sódio (DS) é um dos principais anti inflamatórios presente em grande parte dos medicamentos atuais. Além das indústrias farmacêuticas, os dejetos humanos lançados em águas através de esgotos, são grandes fontes de contaminação ambiental por DS, presente como metabólito. Por ser um contaminante persistente em meios aquáticos, mesmo em baixos níveis, devido a sua toxicidade e baixa biodegradabilidade, causa diversos efeitos bioquímicos na saúde humana além de toxicidade aquática⁽¹⁾.

Diante da necessidade de remoção de DS do meio ambiente, metodologias foram propostas na literatura. Porém, os sistemas aquosos bifásicos (SAB) possuem maiores vantagens por serem baratos, ambientalmente seguros e composto majoritariamente por água. Desta forma, a partição de DS por sistemas aquosos bifásicos foi investigada no presente estudo.

Resultados e Discussão

A Figura 1 apresenta o efeito do comprimento da linha de amarração (CLA) na partição de diclofenaco de sódio (figura 1a) e os valores de energia livre de Gibbs padrão de transferência ($\Delta_{tr}G^\circ$) para cada CLA (figura 1b).

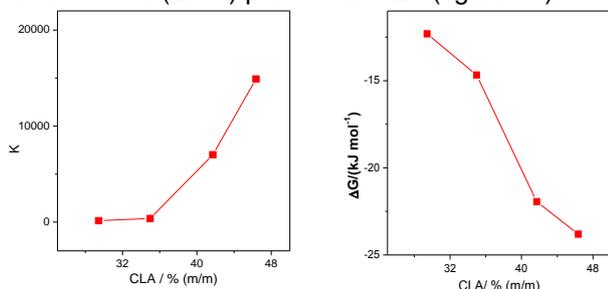


Figura 1: Comportamento de partição do DS para o sistema PEO1500+Li₂SO₄+ H₂O.

Pode-se observar na figura 1 que todos $K_{DS} > 1$ e $\Delta_{tr}G^\circ$ são negativos para todos os CLAs, demonstrando que o DS concentra-se preferencialmente na fase superior, aumentando a sua transferência para esta fase quando o valor do

CLA aumenta. A princípio esses resultados podem ser explicados pelo modelo de Johansson et al² que justifica a partição de um soluto entre as duas fases do sistema devido as contribuições entrópicas (equação 1) e entálpicas (equação 2).

$$\ln K_s = \frac{M_s}{\rho} \left(\frac{n^{FS}}{V^{FS}} - \frac{n^{FI}}{V^{FI}} \right) \quad (1)$$

$$\ln K_s = -\frac{M_s}{RT} \left[\sum_{i=1}^3 (\Phi_i^{FS} - \Phi_i^{FI}) w_{is} - \sum_{i=1}^2 \sum_{j=2}^3 (\Phi_i^{FS} \Phi_j^{FS} - \Phi_i^{FI} \Phi_j^{FI}) w_{ij} \right] \quad (2)$$

De acordo com a equação 1, ocorrerá a transferência do DS para a fase com maior densidade numérica de partículas: fase inferior. Porém, esta teoria não condiz com os resultados obtidos. Portanto, a entalpia é a força motriz que rege o comportamento de partição, indicando que ocorre interações DS-polímero.

O aumento do CLA é diretamente proporcional à concentração de polímero na fase superior. Sendo assim, em maiores CLAs, a quantidade de interações entre DS-polímero é maior, justificando o aumento nos valores de partição.

A tabela 1 apresenta os coeficientes de partição em função da massa molar e hidrofobicidade do polímero.

Tabela 1: Coeficientes de partição para os sistemas constituídos por polímero+(NH₄)₂SO₄ +H₂O.

Polímero	Coeficiente de partição (K)
PEO400	337,6588
PEO1500	776,5281
L35	2302,2483
PEO4000	78497,5305

De acordo com a tabela 1, os coeficientes de partição são maiores para polímeros mais hidrofóbicos. Com aumento da hidrofobicidade da fase superior, a entropia configuracional do DS diminui, indicando que o efeito entálpico se sobrepõe ao entrópico na partição do DS.

Conclusões

Conclui-se que a partição de DS é governada por fatores entálpicos, é mais eficiente em maiores CLAs e na presença de polímeros mais hidrofóbicos. Os elevados valores de K_{DS} demonstram o potencial do SAB para remoção de DS de matrizes diversas.

Agradecimentos

RQ-MG, FAPEMIG, CNPq, CAPES

¹ Thanhmingiana, D.T. *Chem.Eng. J.* **2014**, pp1385-8947.

² Johansson, H. O.; Karlström, G.; Tjerneld, F.; Haynes, C. H.; *J. Chrom. B.* **1998**, 711, pp 3–17.