



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO TOCANTINS  
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE GURUPI  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA**

**CLEIDIANE CARDOSO TEIXEIRA**

**ESTUDO TEÓRICO DA ADSORÇÃO DE TRICLOSAN EM MATRIZ DE  
QUITOSANA**

**Gurupi, TO  
2025**

**CLEIDIANE CARDOSO TEIXEIRA**

**ESTUDO TEÓRICO DA ADSORÇÃO DE TRICLOSAN EM MATRIZ DE  
QUITOSANA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação  
em Química da Universidade Federal do Tocantins  
(UFT), como requisito à obtenção do grau de Mestre em  
Química

Orientador (a): Prof. Dr. Douglas Henrique Pereira

**Gurupi, TO  
2025**

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)**  
**Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Tocantins**

---

- T266e Teixeira, Cleidiane Cardoso.  
Estudo teórico da adsorção de triclosan em matriz de quitosana. /  
Cleidiane Cardoso Teixeira. – Gurupi, TO, 2025.  
44 f.
- Dissertação (Mestrado Acadêmico) - Universidade Federal do Tocantins  
– Câmpus Universitário de Gurupi - Curso de Pós-Graduação (Mestrado) em  
Química, 2025.
- Orientador: Douglas Henrique Pereira
1. Triclosan. 2. Quitosana. 3. Adsorção. 4. Química Computacional. I.  
Título

**CDD 540**

---

TODOS OS DIREITOS RESERVADOS – A reprodução total ou parcial, de qualquer forma ou por qualquer meio deste documento é autorizado desde que citada a fonte. A violação dos direitos do autor (Lei nº 9.610/98) é crime estabelecido pelo artigo 184 do Código Penal.

**Elaborado pelo sistema de geração automática de ficha catalográfica da UFT com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).**

**Cleidiane Cardoso Teixeira**

**ESTUDO TEÓRICO DA ADSORÇÃO DE TRICLOSAN EM MATRIZ DE  
QUITOSANA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Química. Foi avaliado para a obtenção do título de Mestre em Química e aprovada em sua forma final pelo Orientador e pela Banca Examinadora.

Data de aprovação: 20 / 05 / 2025

Banca Examinadora

---

Prof. Dr. Leonardo Tsuyoshi Ueno – ITA

---

Profa. Dra. Grasielle Soares Cavallini – UFT

---

Prof. Dr. Douglas Henrique Pereira – ITA

## AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, pela minha vida, e por me permitir ultrapassar todos os obstáculos encontrados ao longo da realização deste trabalho. Aos meus pais, Edio Pereira Cardoso e Olivia Teixeira Dias por todo o apoio e compreensão, por toda a motivação que me deram. Aos meus irmãos pelo o apoio durante essa jornada.

Agradeço ao meu orientador, o Prof. Dr. Douglas Henrique Pereira, por todo o direcionamento ao longo dessa etapa e por suas sugestões de grande valia para a conclusão da dissertação.

À Universidade Federal do Tocantins, instituição essencial no meu processo de formação profissional, pela dedicação e por tudo o que aprendi ao longo dos anos do curso. À equipe do laboratório de Matemática Aplicada e Química Computacional (LABMAQC). À CAPES e ao Programa de Pós-Graduação em Química Ambiental. Agradeço também á FAPESP- Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (Grant #2023/17727-2), pelo recurso financeiro para a realização da pesquisa.

## RESUMO

O composto Triclosan (TCS) é muito utilizado em produtos de higiene pessoal, tornando-se comum em efluentes sanitários. Quando estes efluentes não forem tratados de forma adequada, este contaminante pode atingir os recursos hídricos e, conseqüentemente, promover riscos à saúde humana e ao ambiente. A ingestão de TCS pode causar problemas como desequilíbrios metabólicos, problemas intestinais e tumores no fígado. Uma alternativa sustentável para a remoção desse contaminante é o uso de biopolímeros adsorventes, os quais possuem baixo custo, são renováveis e biodegradáveis. Um dos biopolímeros mais promissores é a quitosana (QT) que possui excelentes propriedades adsorptivas devido aos seus grupos funcionais presentes na sua estrutura. Neste contexto, o presente trabalho avaliou por meio de simulações computacionais, a interação da molécula de triclosan com a quitosana. Os orbitais moleculares de fronteira e os mapas de potenciais eletrostáticos evidenciaram que diferentes formas de interações podem ocorrer, e assim, todos os complexos se mostraram estáveis após a otimização das interações. Os comprimentos de ligação das interações variaram de 1,839 Å a 3,606 Å e as interações foram formadas principalmente por ligações de hidrogênio onde as interações variaram de 1,839 Å a 2,822 Å. As distâncias de interações entre H...Cl variam entre 2,963 Å a 3,606 Å, e teve interação Van der Waals em que as distâncias variaram entre 2,593 Å a 3,143 Å. A energia de ligação permitiu inferir que a adsorção ocorre ( $\Delta E_{\text{Bind}} < 0$ ), além disso, as propriedades termodinâmicas mostraram que o processo é exotérmico e que dois complexos são espontâneos. Os parâmetros topológicos do gerados pela teoria quântica de átomos em Moléculas mostraram que quase todas as interações entre o TCS-QT foram eletrostáticas e a análise de interação não covalente ratificou a presença de interações de Van der Waals entre os complexos. Desta forma, pode-se confirmar que o estudo evidenciou a eficiência da quitosana para o tratamento de água e efluentes contaminados por Triclosan.

**Palavras-chaves:** Triclosan, Quitosana, Química Computacional, Interações.

## ABSTRACT

The compound Triclosan (TCS) is widely used in personal hygiene products and is commonly found in sanitary effluents. When these effluents are not treated properly, this contaminant can reach water resources and, consequently, pose risks to human health and the environment. Ingestion of TCS can cause problems such as metabolic imbalances, intestinal problems and liver tumors. A sustainable alternative for removing this contaminant is the use of adsorbent biopolymers, which are low-cost, renewable and biodegradable. One of the most promising biopolymers is chitosan (QT), which has excellent adsorptive properties due to the functional groups present in its structure. In this context, this study evaluated, through computational simulations, the interaction of the triclosan molecule with chitosan. The frontier molecular orbitals and electrostatic potential maps showed that different forms of interactions can occur, and thus, all complexes were stable after optimization of the interactions. The bond lengths of the interactions ranged from 1.839 Å to 3.606 Å and the interactions were mainly formed by hydrogen bonds where the interaction ranged from 1.839 Å to 2.822 Å. The distance of interactions between H...Cl ranged from 2.963 Å to 3.606 Å, and had Van der Waals where the interaction distances ranged from 2.593 Å to 3.143 Å. The binding energy allowed to infer that adsorption occurs ( $\Delta E_{\text{Bind}} < 0$ ), in addition, the thermodynamic properties showed that the process is exothermic and that two complexes are spontaneous. The topological parameters generated by the quantum theory of atoms in molecules showed that almost all interactions between TCS-QT were electrostatic and the non-covalent interaction analysis ratified the presence of Van der Waals interactions between the complexes. Thus, it can be confirmed that the study demonstrated the efficiency of chitosan for the treatment of water and effluents contaminated by Triclosan.

**Keywords:** Triclosan, Chitosan, Computational Chemistry, Interactions.

## LISTA DE ILUSTRAÇÃO

Figura 1: Estrutura molecular do triclosan .....	18
Figura 2: Estrutura da quitosana.....	22
Figura 3: Orbitais Moleculares de Fronteira HOMO-LUMO para o triclosan (TCS) (a) e para a quitosana (QT) (b) .....	24
Figura 4: Mapa de Potencial Eletrostático do Triclosan (a) e da Quitosana (b).....	25
Figura 5: Configurações estruturais dos sistemas formados entre o triclosan e a quitosana para TCS...QT <sup>i-v</sup> .....	26
Figura 6: Gráficos moleculares gerados pela QTAIM com destaque dos pontos críticos interação para os complexos TCS-QT <sup>i-v</sup> .....	30
Figura 7: Gráficos de interação não covalente 3D (esquerda) e gráficos 2D (direita) do gradiente da densidade versus densidade eletrônica multiplicada pelo o sinal do auto valor do segundo Hessiano para complexos TCS...QT <sup>i-v</sup> .....	34

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Análise estrutural das interações para os complexos formados entre o Triclosan e a Quitosana .....	28
Tabela 2: Energias de interação eletrônica ( $\Delta E_{\text{Bind}}$ ) a 0 K, entalpia e energia de Gibbs ( $\Delta G$ ) a 298 K para os complexos estudados.....	29
Tabela 3: Parâmetros topológicos das interações entre o Triclosan e a Quitosana gerados pela QTAIM. Valores em au .....	32

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

au	Unidade Atômica
BCP	<i>Bond Critical Point</i>
CE	Contaminantes Emergentes
DFT	<i>Density Functional Theory</i>
ETE	Estação de Tratamento de Esgoto
eV	Elétron-volt
FDA	<i>Food and Drug Administration</i>
FMO <sub>s</sub>	Orbitais Moleculares de Fronteira
HOMO	<i>Highest Occupied Molecular Orbital</i>
LUMO	<i>Lowest Unoccupied Molecular Orbital</i>
MEP	<i>Molecular Electrostatic Potential</i>
NCI	<i>non-covalent interaction</i>
QT	Quitosana
QTAIM	<i>Quantum Theory of Atoms in Molecules</i>
RDG	Gradiente de Densidade Reduzido
TCS	Triclosan

## LISTA DE SÍMBOLOS

$G(\mathbf{r})$	Energia Cinética
$H(\mathbf{r})$	Densidade total de energia eletrônica
$V(\mathbf{r})$	Densidade de energia eletrônica potencial
$\rho(\mathbf{r})$	Densidade eletrônica
$(\lambda_2)$	Densidade Eletrônica de Picos
$\nabla^2\rho(\mathbf{r})$	Laplaciana da densidade eletrônica

## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>13</b>
<b>1.1 OBJETIVOS .....</b>	<b>15</b>
1.1.1 Objetivo Geral .....	15
1.1.2 Objetivos Específicos .....	15
<b>1.2 METODOLOGIA.....</b>	<b>16</b>
<b>2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....</b>	<b>18</b>
2.1 Contaminantes Emergentes .....	18
2.2 Triclosan .....	18
2.3 Adsorção.....	19
2.4 Adsorventes .....	21
2.5 Quitosana.....	21
<b>3 RESULTADOS E DISCUSSÃO .....</b>	<b>24</b>
3.1 Orbitais Moleculares de Fronteira (FMO <sub>s</sub> ).....	24
3.2 Mapa Potencial Eletrostático (MEP).....	24
3.3 Propriedades Estruturais .....	25
3.4 Energia de Ligação, Entalpia e Energia de Gibbs .....	29
3.5 Teoria Quântica de Átomos em Moléculas (QTAIM) .....	30
3.6 Interações Não Covalentes (NCI).....	34
<b>4 CONSIDERAÇÕES FINAIS.....</b>	<b>36</b>
<b>4.1 CONTRIBUIÇÕES DA DISSERTAÇÃO .....</b>	<b>38</b>
<b>REFERÊNCIAS .....</b>	<b>39</b>

## 1 INTRODUÇÃO

O 5-cloro-2-[2,4-diclorofenoxi]fenol conhecido como triclosan (TCS) é uma substância antibacteriana que pode ser encontrada em produtos de higiene pessoal como desodorantes, cremes dentais sabonetes e também em cosméticos. Seu uso frequente vem causando uma grande preocupação, pois pode causar problemas à saúde humana e também ao meio ambiente (Yao et al., 2024).

A contaminação por triclosan em ambientes aquáticos pode ocorrer pelo lançamento de águas residuárias em corpos hídricos, e no solo, por meio de irrigação com águas residuárias e superficiais contaminadas (Olaniyan et al., 2016). Devido as suas características de lipofilicidade e bioacumulação, o TCS entra nas cadeias alimentares pela absorção das plantas, e assim, podem atingir animais, e conseqüentemente, afetar à saúde humana (Medellín-Castillo et al., 2024; Nie et al., 2024). A intoxicação por TCS pode causar vários problemas à saúde humana, tais como, desregulação endócrina, problemas intestinais e tumores no fígado (Zhang et al., 2024). Em espécies aquáticas a exposição por TCS pode causar efeitos mutagênicos, carcinogênicos e imunogênicos (Rishika et al., 2024). A presença do TCS no solo afeta a estrutura e a função dos microrganismos, e com isso inibe a biodegradação de outras substâncias (Tang et al., 2019). Além da contaminação direta, o TCS pode se transformar através da radiação ultravioleta em dioxinas como o 2,8 diclorodibenzeno-p-dioxinas que são contaminantes altamente tóxico (Zhou et al., 2023).

O TCS é encontrado em baixas concentrações no meio ambiente, no entanto, a ingestão diária aceitável de TCS é de 0,17 nmol/kg/dia (Olaniyan et al., 2016). Além disso, há evidência de que os processos de tratamentos convencionais não são suficientes para a remoção desse contaminante por completo, ocorrendo a contaminação de águas superficiais por esgoto doméstico tratado, por isso, o uso de tratamentos avançados é necessário (Yoon et al., 2023). Nesse contexto, destaca-se o processo de adsorção, que possui como vantagem a utilização de diferentes adsorventes como, por exemplo, carvão ativado, grão de café, caule de abacaxi, caroço de azeitona, quitosana dentre outros (Schutz, 2016; Hu et al., 2024; El Messaoudi et al., 2024).

Entre os materiais adsortivos, os biopolímeros são alternativas sustentáveis, apresentam baixo custo e se destacam na remoção de diferentes contaminantes (Liu et al., 2023; Biswas e Pal, 2021). Entre os biopolímeros, a quitosana (QT) apresenta alta aplicabilidade em diversas áreas (Nugraha et al., 2025), é o segundo biopolímero mais

renovável e biodegradável mais abundante, sendo obtido através da desacetilação da quitina (Xiang et al., 2023).

A quitosana é o principal derivado da quitina, é formada por uma estrutura heterogênea composta por 2-acetamido-2-desoxi- $\beta$ -d-glucopiranosose ligada a 1-4 e 2-amino-2-desoxi- $\beta$ -d-glucopiranosose e se diferencia da quitina pela presença de um grupo amino na cadeia, fazendo com que a QT seja solúvel em ácidos fracos (Dias et al., 2013; Azevedo et al., 2007). A QT possui na sua estrutura grupos funcionais essenciais, que incluem grupos aminos primários, grupos hidroxila primários e secundários, que são muito reativos com diversos reagentes, além disso, há também os grupos acetamidas e ligações glicosídicas. Estes grupos apresentam oportunidades de modificação, o que permite assim criar polímeros e compósitos com propriedades diferentes (Vo et al., 2024; Yu et al., 2024).

Em conjunto com dados experimentais, as simulações computacionais têm se mostrado alternativas interessantes nos estudos de processos adsorptivos, pois oferece uma compreensão em nível atômico/molecular do processo, permite avaliar diferentes matrizes adsorventes, adsorvatos e verificar suas interações, permitindo prever se o processo é termodinamicamente e cineticamente viável (Xiang et al., 2024; Hassan et al., 2017; Akichouh et al., 2024). Assim, estudar teoricamente a interação do contaminante emergente TCS com a matriz de Quitosana pode gerar resultados em nível molecular do processo e estas informações podem contribuir para seu uso na remediação ambiental.

## 1.1 OBJETIVOS

### 1.1.1 Objetivo Geral

O trabalho tem como o objetivo utilizar cálculos teóricos para estudar a interação do triclosan numa matriz de quitosana.

### 1.1.2 Objetivos Específicos

1. Estudar os mecanismos de interação do triclosan com a matriz de quitosana;
2. Compreender os principais efeitos estereoeletrônicos responsáveis pela a interação;
3. Usar a teoria Quântica de Átomos em Moléculas para elucidar a topologia das interações;
4. Usar a teoria de interação não-covalente para compreender os tipos de interações responsáveis pelo processo adsortivo.

## 1.2 METODOLOGIA

Para o cálculo da interação do TCS com a QT foi utilizada a teoria do funcional de densidade (DFT- *Density functional theory*) (Morgon; Coutinho, 2007) e os cálculos foram realizados com o programa Gaussian 16 (Frisch et al., 2016). Para todo o trabalho foi usado o método  $\omega$ -B97XD (Chai; Head-Gordon, 2008) com funções de base 6-31+G(d,p) (Petersson et al., 1988; Petersson; Al-Laham, 1991). O programa GaussView (Dennington; A. Keith; M. Millam, 2009) foi utilizado no desenho das estruturas e também para gerar os Orbitais moleculares de fronteira (FMOs – Frontier Molecular Orbitals) e os mapas de potencial eletrostático (MEPs – *Molecular Electrostatic Potential*). As moléculas do TCS e QT isoladas e suas interações foram otimizadas e nenhuma frequência imaginária encontrada, evidenciando que as estruturas estavam no mínimo de energia. O efeito da água como solvente foi simulada com o solvente implícito SMD (Solvation Model based on Density) (Marenich et al., 2009).

Os valores de HOMO (*highest occupied molecular orbital*) e LUMO (*lowest unoccupied molecular orbital*) das moléculas isolados foram calculados e o valor do gap de energia determinada pela equação 1.

$$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}} \quad (1)$$

Para quantificar as interações entre o adsorvente e o adsorbato, foram calculadas a energia de ligação ( $\Delta E_{\text{Bind}}$ ), a entalpia e a energia de Gibbs foram utilizadas para avaliar se a adsorção é endotérmica ou exotérmica e se é espontânea ou não, (equações 2-4).

$$\Delta E_{\text{Bind}} = E_{\text{QT-TCS}} - (E_{\text{QT}} + E_{\text{TCS}}) \quad (2)$$

$$\Delta H = H_{\text{QT-TCS}} - (H_{\text{QT}} + H_{\text{TCS}}) \quad (3)$$

$$\Delta G = G_{\text{QT-TCS}} - (G_{\text{QT}} + G_{\text{TCS}}) \quad (4)$$

A energia do ponto zero (ZPE) foi somada à energia eletrônica e nenhum fator de escala utilizado.

Para caracterizar as interações entre o TCS e matriz da QT, bem como a natureza da interação foram realizadas análises QTAIM. A QTAIM permite uma análise quântica sobre a localização e o comportamento dos átomos em um ligação, de acordo com a densidade eletrônica do sistema (Bader, Essen, 1984; Bader, 1990).

Os dados topológicos dos sistemas foram descritos pela *Quantum Theory of Atoms in Molecules* (QTAIM) nos pontos críticos de ligação das interações. Os parâmetros calculados pela QTAIM foram:  $\rho(r)$  (densidade eletrônica),  $\nabla^2\rho(r)$  (laplaciana da densidade eletrônica),  $G(r)$  (energia cinética),  $V(r)$  (densidade de energia eletrônica potencial),  $H(r)$  (densidade total

de energia eletrônica). Com base QTAIM quando dois átomos interagem entre si forma uma trajetória de ligação, a formação desta trajetória de gradiente de densidade origina-se a partir de um ponto localizado entre dois átomos conhecidos como ponto crítico de ligação (*BCP – Bond Critical Point*) e as propriedades analisadas nestes pontos fornecem informações com relação as características da ligação. A energia eletrônica total ( $H$ ) do ponto crítico de ligação (*BCP*) é definida com base a equação 5 (Bader E Essen, 1984; Bader, 1990).

$$H(r) = G(r) + V(r) \quad (5)$$

As energias das ligações de hidrogênios ( $E_{HB}$ ) da interação no ponto crítico foram quantificadas pela equação 6, (Espinosa e Lecmte 1998).

$$E_{HB} = 1/2 |V(r)|_{BCP} \quad (6)$$

A função de isossuperfície do gradiente de densidade reduzido (*RDG*) foi utilizada para calcular o índice de interação não covalente (*NCI*) usando, equação 7.

$$RDG = \frac{1}{2(3\pi^2)^{1/3}} \frac{|\nabla\rho(\mathbf{r})|}{\rho(\mathbf{r})^{4/3}} \quad (7)$$

O software Multiwfn (Lu; Chen, 2012) foi utilizado para realizar os cálculos de interação não covalente (*NCI- non-covalent interaction*), e o software Dinâmica Molecular Visual (*VMD- Visual Molecular Dynamics*) (Humphrey; Dalke; Schulten, 1996) foi Utilizado para visualizar os resultados obtidos.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1 Contaminantes emergentes

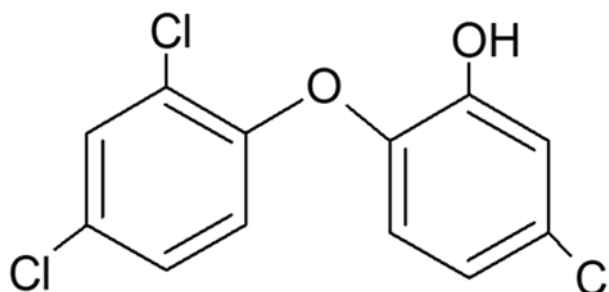
São chamados de contaminantes emergentes (CEs), os grupos de contaminantes que ainda não apresentam informações sobre a sua toxicidade e que normalmente são encontrados em pequenas concentrações no meio ambiente. Uma ampla gama de substância orgânicas e inorgânicas são classificadas como CE o que inclui produtos de higiene pessoal, produtos farmacêuticos, hormônios, detergentes entre outros (Bracamontes-Ruellas et al., 2025).

Os CEs são um desafio global, pois apresentam um alto risco para qualidade da água, à saúde humana e aos ecossistemas. Outro problema dos CEs é sua presença em águas residuárias que não foram tratadas e também em águas residuárias tratadas em Estação de Tratamento de Águas Residuais (ETE) (Nathanael et al., 2024).

### 2.2 Triclosan

O triclosan (TCS) (5-cloro-2-[2,4-diclorofenoxi] fenol) Figura 1, é uma substância antibacteriana que é frequentemente utilizada em produtos de higiene pessoal, como por exemplo pasta de dente, sabonete e desodorantes. A sua concentração nesses produtos varia entre 0,1% a 0,3%. No entanto, devido ao seu uso indiscriminado e a remoção incompleta nas (ETE), o TCS é comumente encontrado em diferentes matrizes ambientais, incluindo sedimentos, águas fluviais, águas superficiais e águas subterrâneas (Lee et al., 2024, Olaniyan et al; 2016; Jiang et al., 2024).

Figura 1: Estrutura molecular do triclosan.



Fonte: Autora, 2025

Nesse contexto, considerando sua persistência ambiental, e devido as suas características de baixa solubilidade em água e alta lipofilicidade, a presença do TCS no ecossistema aquático pode resultar em múltiplos efeitos ecotoxicológicos adversos sobre os organismos ali presente, tais como: efeitos morfológicos, bioquímicos e fisiológicos. Morfológicamente têm-se a inibição do crescimento, anormalidades de órgão e malformação. Os efeitos bioquímicos incluem estresse oxidativo, alterações resultantes de enzimas antioxidantes e danos ao DNA, enquanto os efeitos fisiológicos implicam na diminuição da fecundidade e na redução da expectativa de vida dos organismos. Esses efeitos são influenciados por fatores como: temperatura, o pH e o tempo de exposição (Lee et al., 2024; Lee et al., 2023, Park et al 2017). Dentre esses fatores, destaca-se a temperatura, que interfere diretamente nas respostas biológicas dos organismos, uma vez que o seu aumento reduz a concentração de oxigênio dissolvido disponível na água, comprometendo o processo respiratório. Ademais, em condições de exposição solar e em pH alcalino, o TCS pode sofrer fotólise, convertendo-se em outros compostos com maior toxicidade, como, 2,3-diclorobenzeno-p-dioxinas e diclorofenol (Li et al., 2018).

Esses aspectos ambientais de toxicidade se somam aos efeitos nocivos do TCS sobre a saúde humana, uma vez que o composto apresenta toxicidade relevante para seres humanos, causando diversos impactos à saúde, como desequilíbrios metabólicos, incluído obesidade e distúrbio endócrino, além do aumento do risco de malformação congênitas. A contaminação pelo TCS pode ocorrer por vias inalatória, oral ou por absorção dérmica (Jiang et al., 2024; Kumar et al., 2021). Cabe destacar que devido aos problemas que o TCS pode causar, o uso desse composto em produtos de higiene pessoal foi banido pela *Food and Drug Administration* (FDA) (Lee et al., 2024).

Diante desses riscos à saúde humana e ao meio-ambiente, torna essencial adotar medidas eficazes para sua remoção nas Estações de Tratamento de Esgotos (ETE), utilizando tratamentos avançados, como o processo de adsorção, qual apresenta alta eficiência na remoção de contaminantes.

### 2.3 Adsorção

Adsorção é um processo no qual uma substância irá se concentrar na superfície de uma determinada substância sólida podendo esta substância inicialmente estar no estado líquido ou gasoso. Esse processo é considerado como uma transferência de massa, pois possibilita a separação dos componentes presentes. Essa separação ocorre devido a diferentes

mecanismos de adsorção, os quais influenciam a seletividade e a eficiência do processo (Nascimento et al., 2020; Pourhakkak et al., 2021; García-Rollan et al., 2025).

Os processos de separação por adsorção consistem em três mecanismos diferentes: estéricos, cinético e de equilíbrio (Abdullah et al., 2019). No mecanismo estérico, os poros do material do adsorvente têm dimensões específicas permitindo que determinadas moléculas possam entrar, excluindo as demais. O mecanismo cinético, se baseia nas distintas difusibilidades das inúmeras espécies nos poros dos adsorventes (Do 1998, Mei et al., 2025). Por fim, mecanismo de equilíbrio é um processo no qual a taxa de adsorção que as moléculas do adsorvato se concentra na superfície do adsorvente é igual a taxa de dessorção, e para descrever esse equilíbrio se utilizam isotermas. (Zola, 2007).

Nesse contexto, dois tipos de interação podem ocorrer: adsorção física (fisissorção) e química (quimissorção). A adsorção física caracteriza-se por interações fracas entre o adsorvato e o adsorvente e essas interações podem ser do tipo van der Waals, sendo o processo considerado reversível (Zhang et al., 2025). Por outro lado, na adsorção química ocorre transferências de elétrons entre a molécula do adsorvato com a superfície do adsorvente, e com isso ocorre a formação de uma ligação química. A adsorção química é específica, pois nem toda área da superfície do adsorvente possui sítio ativo capaz de adsorver quimicamente o adsorvato (Atkins, 2008). Em contraste, a fisissorção é de natureza inespecífica, ocorrendo em toda superfície do adsorvente e sendo, portanto, considerada não localizada (Tan et al., 2007).

Sob o ponto de vista termodinâmico, a adsorção física apresenta um consumo energético relativamente baixo, geralmente inferior  $10 \text{ kcal mol}^{-1}$ , ou seja, da ordem de condensação ou vaporização. Em contrapartida, a adsorção química demanda um aporte energético significativamente maior, da ordem do calor da reação, portanto acima de  $20 \text{ kcal mol}^{-1}$  (Nascimento et al., 2020).

A eficiência do processo de adsorção está intrinsecamente relacionada a diversos fatores, incluindo temperatura, superfície de contato, propriedades do adsorvato-adsorvente e do pH do meio (Kumar et al., 2021). Em comparação com outras técnicas de remoção de contaminantes o processo de adsorção tem se mostrado muito eficiente para a remoção de poluentes devido ao seu baixo custo, boa eficiência e de fácil operação (Heryanto et al., 2024).

Os parâmetros termodinâmicos são de fundamental importância na determinação da viabilidade termodinâmica de um sistema. Entre os principais parâmetros se destacam-se a energia de Gibbs, entalpia e energia de ligação. A análise desses parâmetros permite inferir se

o processo de adsorção ocorre e se é espontâneo e se é termodinamicamente favorável (Dabrowski, 2001, Muller, 2019).

#### 2.4 Adsorventes

Os adsorventes são compostos capazes de separar uma ou mais espécies no estado líquido ou gasoso, desempenhando um papel crucial nas industriais e em aplicações ambientais para remoção de contaminantes (Biglari e Salehi, 2025). Nesse contexto, os adsorventes promissores devido às suas características são os polissacarídeos, pois são abundantes na natureza, e renováveis, diferente dos adsorventes tradicionais como o carvão ativado. Os polissacarídeos são compostos que possuem cadeias longas de unidade monossacarídicas ligadas por ligações glicosídicas, possuem propriedades físico-químicas que são favoráveis no processo de adsorção como elevada área superficial, porosidade e uma boa estabilidade (Fakhri et al., 2023; Saiyad et al., 2024).

Os polissacarídeos como a quitosana, a celulose e alginato são provenientes de fontes biológicas, que incluem fungos, plantas, algas, animais e essas disponibilidades não torna-os apenas adsorventes mais econômico, mas também ecológicos e sustentáveis (Abbasi et al., 2023). A biodegradabilidade desses adsorventes permite a diminuição dos impactos ambientais que estão relacionados à geração de resíduos, aumento sua versatilidade de uso em processos adsorptivos (Hamidon et al., 2024).

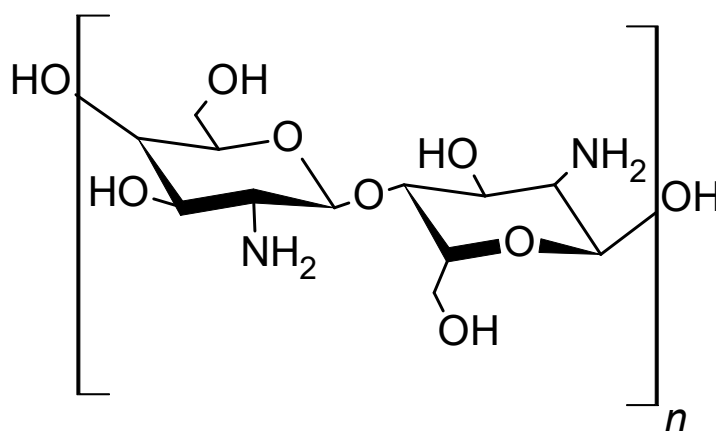
#### 2.5 Quitosana

A quitosana (QT) é um polissacarídeo de origem natural, obtido através da desacetilação da quitina, é o segundo polissacarídeo mais abundante na natureza, sendo superada somente pela celulose (Biswas et al., 2025). A QT é encontrada nos exoesqueletos de crustáceos, como por exemplo: camarões, caranguejos, lagosta, siri entre outros (Keshvardoostchokami et al., 2021). Para obtenção da quitosana, a quitina passa por três processos após a extração dos exoesqueletos de crustáceos, sendo eles a desmineralização, desproteínização e desacetilização (Vo et al., 2024). A etapa da desmineralização é responsável pela retirada de conteúdo mineral, o processo de desproteínização envolve a remoção de proteínas e o processo de desacetilação promove a conversão da quitina para quitosana. A conversão é feita através da remoção dos grupos acetil por meio de tratamento alcalino, em temperaturas e concentrações variáveis (Kumar et al., 2025).

Existem dois tipos de desacetilação para a obtenção de quitosana: a desacetilação química e a enzimática. Na desacetilação química utiliza-se soluções alcalinas em alta concentração, mas devido as suas desvantagens como um alto uso de energia e problemas com a poluição, a desacetilação enzimática é uma alternativa mais interessante pois utiliza enzimas na hidrólise de ligações N-acetamida (Pakizeh et al., 2021). As enzimas que promovem a desacetilação tem uma grande afinidade de ligação para polímeros de N-acetil-D-glucosamina e são estáveis em temperatura elevada, no entanto o processo de desacetilação enzimática não é muito utilizada devido ao seu alto custo de operação (Das et al., 2024).

A Figura 2 apresenta a estrutura simplificada da quitosana, um polímero de cadeia longo formada por unidades de D-glicosamina e N-acetil-D-glicosamina ligadas por ligações  $\beta(1-4)$ -glicosídicas. Embora a representação mostre apenas unidades de D-glicosamina é importante destacar que, ao longo da cadeia polimérica, podem estar presentes frações de N-acetil-D-glicosamina, remanescentes da quitina original. A proporção entre essas duas unidades depende do grau de desacetilação, que indica a quantidade relativa de grupos amina livres em comparação aos grupos acetilados (Nandini et al., 2025). Quando a fração de unidades D-glicosamina for superior a 50%, o polímero é chamado de quitosana e a quantidade de glucosamina é denominado de grau de desacetilização. Quando as unidades de N-acetil-D-glicosamina for superior a 50% tem-se a quitina e a quantidade de grupos acetamida é chamado de grau de acetilação (Mallik et al., 2022). Em relação a solubilidade, a quitosana é insolúvel em soluções em pH alcalino, e pela presença de grupos aminos na sua estrutura faz com ela se torna solúvel em pH ácido (Hamid et al., 2024; Vo et al., 2024).

Figura 2: Estrutura molecular da quitosana.



Fonte: Autora, 2025.

A quitosana pode ser encontrada em forma de pó, flocos ou em fibras. Esse polissacarídeo apresenta uma elevada massa molecular, podendo ser utilizada em filmes e

revestimentos mais espessos e estáveis, e ser aplicadas em diversas áreas como agricultura, tratamento de água, na indústria alimentícia e biofarmacêutica. Sua maior aplicação tem sido na área da biomedicina, que inclui administração de medicamentos, cicatrização de feridas e terapias antitumorais, por ser um biopolímero não tóxicos, biocompatível e biodegradável (Yang et al., 2023, Elwakeel et al., 2025).

Considerando todas as propriedades da QT, vale destacar que a quitosana é utilizada como adsorvente no processo de adsorção na remoção de efluentes farmacêuticos, e apresentando uma alta eficiência na remoção de contaminantes (Karimi-Maleh et al., 2021). Além da quitosana apresentar propriedades adsorptivas, também apresenta propriedades coagulantes e floculantes que se fazem necessárias no tratamento de águas residuárias (Rebello et al., 2023).

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

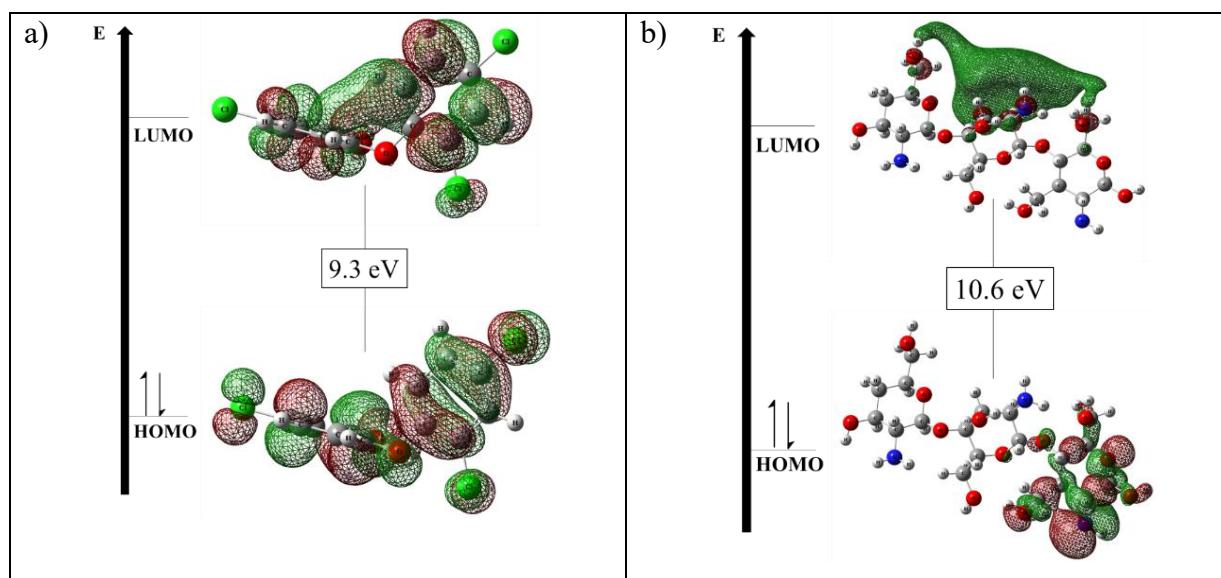
#### 3.1 Orbitais Moleculares de Fronteira (FMOs)

Os orbitais moleculares de fronteira, em especial o HOMO-LUMO mostram diversos resultados sobre os compostos químicos permitindo avaliar a densidade de probabilidade eletrônica e assim avaliar a estabilidade e reatividade das moléculas. Os FMOs para o TCS e a QT foram calculados e os resultados estão representados na Figura 3.

Analisando os resultados da Figura 3 foi possível observar que TCS apresenta orbitais  $\pi$  bem definidos (HOMO e LUMO) sobre toda a molécula. O HOMO da molécula de quitosana apresentou orbitais  $\pi$  em um dos anéis da estrutura, enquanto que o LUMO apresentou uma alta densidade de probabilidade de encontrar o elétron acima do anel central da estrutura, Figura 3.

Os valores do Gap de energia encontrados para o TCS e a QT foram de 9,3 eV e 10,6 eV, respectivamente, indicando que as espécies químicas são estáveis. O valor da  $E_{\text{gap}}$  para a QT também mostrou que a molécula é um bom isolante.

Figura 3: Orbitais Moleculares de Fronteira HOMO-LUMO para o Triclosan (TCS) em (a) e para a Quitosana (QT) em (b)

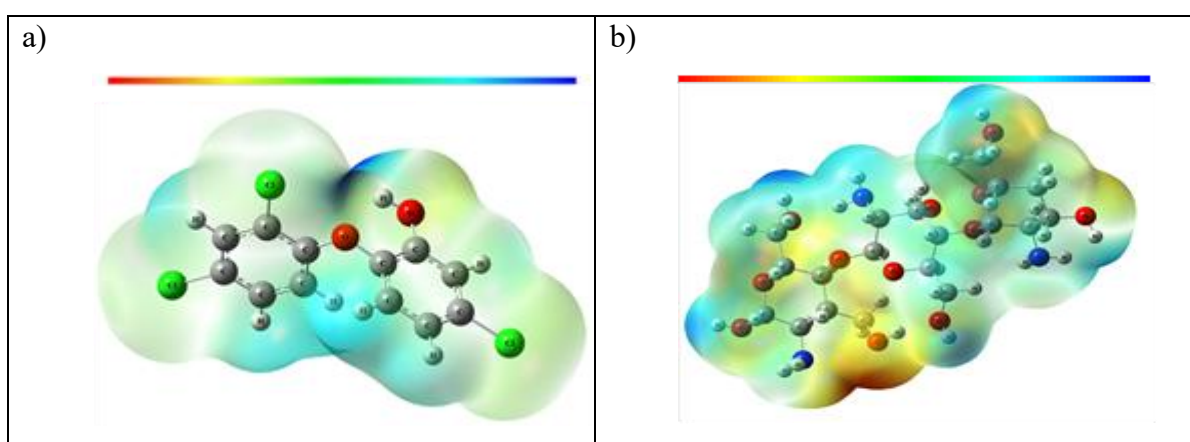


Fonte: Autora, 2025

#### 3.2 Mapa Potencial Eletrostático (MEP)

Outra análise importante é o mapa potencial eletrostático, que oferece informações sobre a reatividade química e também molecular, através da densidade de elétrons da molécula. A interpretação do MEP é feita pela identificação de cores. Regiões mais avermelhadas indicam maior concentração de carga negativa, logo a presença de elétrons; regiões com a cor azul indicam baixa densidade de elétrons, apresentando carga positiva, e regiões com coloração esverdeada indicam uma neutralidade (Sucheta et al., 2022). A Figura 4 apresenta os MEPs do adsorvente-adsorvato.

Figura 4: Mapa Potencial Eletrostático do Triclosan em (a) e da Quitosana em (b).



Fonte: Autora, 2025

Analisando os MEP, Figura 4, foi possível observar que a região das moléculas em que se concentra a cor azul foi predominada pelo átomo de hidrogênio, ou seja, essa região pode interagir com regiões eletronegativas. A região avermelhada encontrada nas moléculas se deve aos átomos de oxigênio, cloro e também pelo átomo de nitrogênio da QT, regiões estas que podem interagir com partes positivas de outras moléculas.

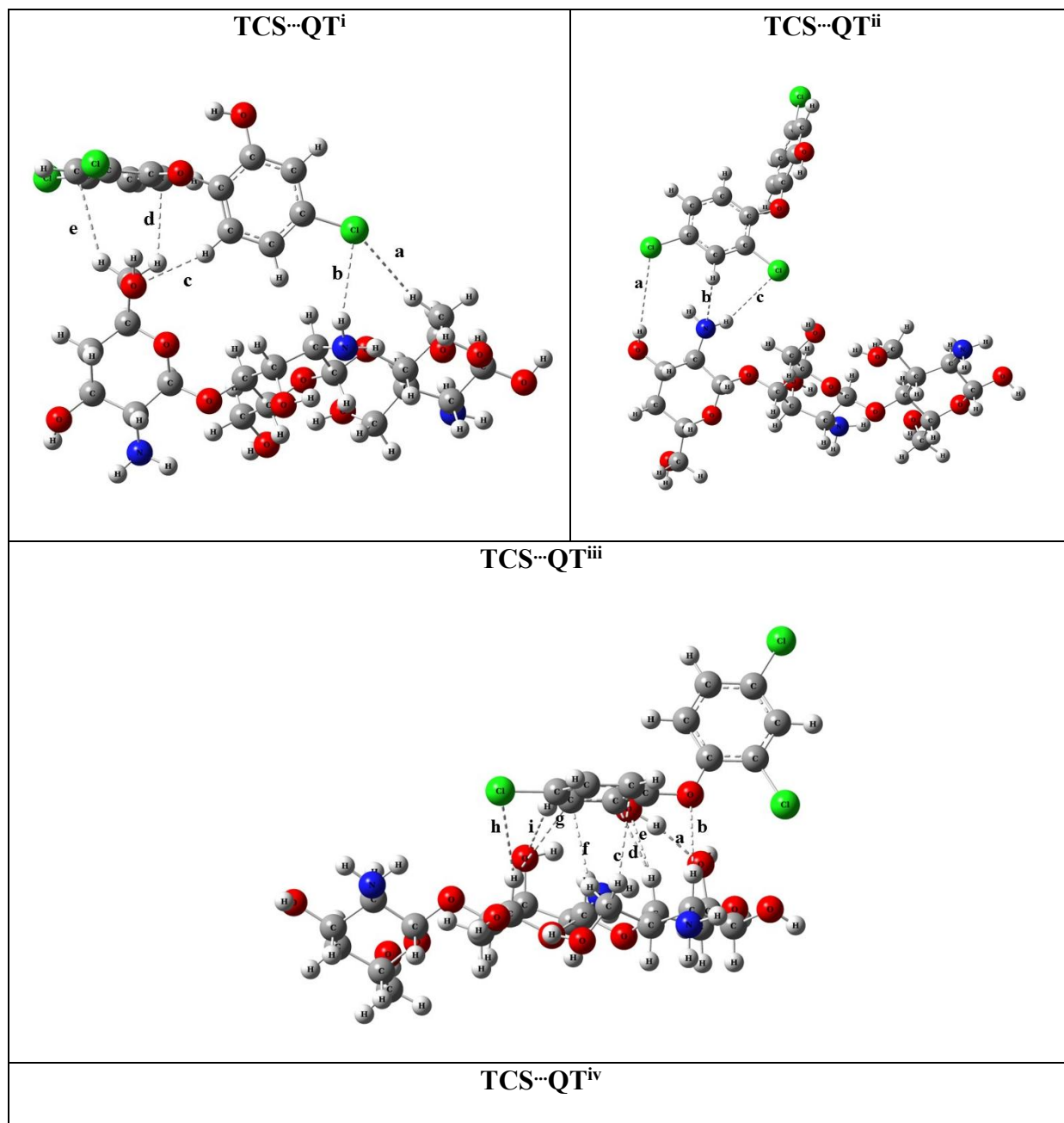
Com os resultados dos FMOs e dos MEPs, foi possível inferir que: i) pode haver interações entre a QT e o TCS ii) estas interações podem ocorrer através de ligações de hidrogênio do TCS, com os átomos de oxigênio e nitrogênio que estão presente na estrutura da QT; iii) pode ocorrer interação através dos orbitais do anel aromático e do cloro do TCS.

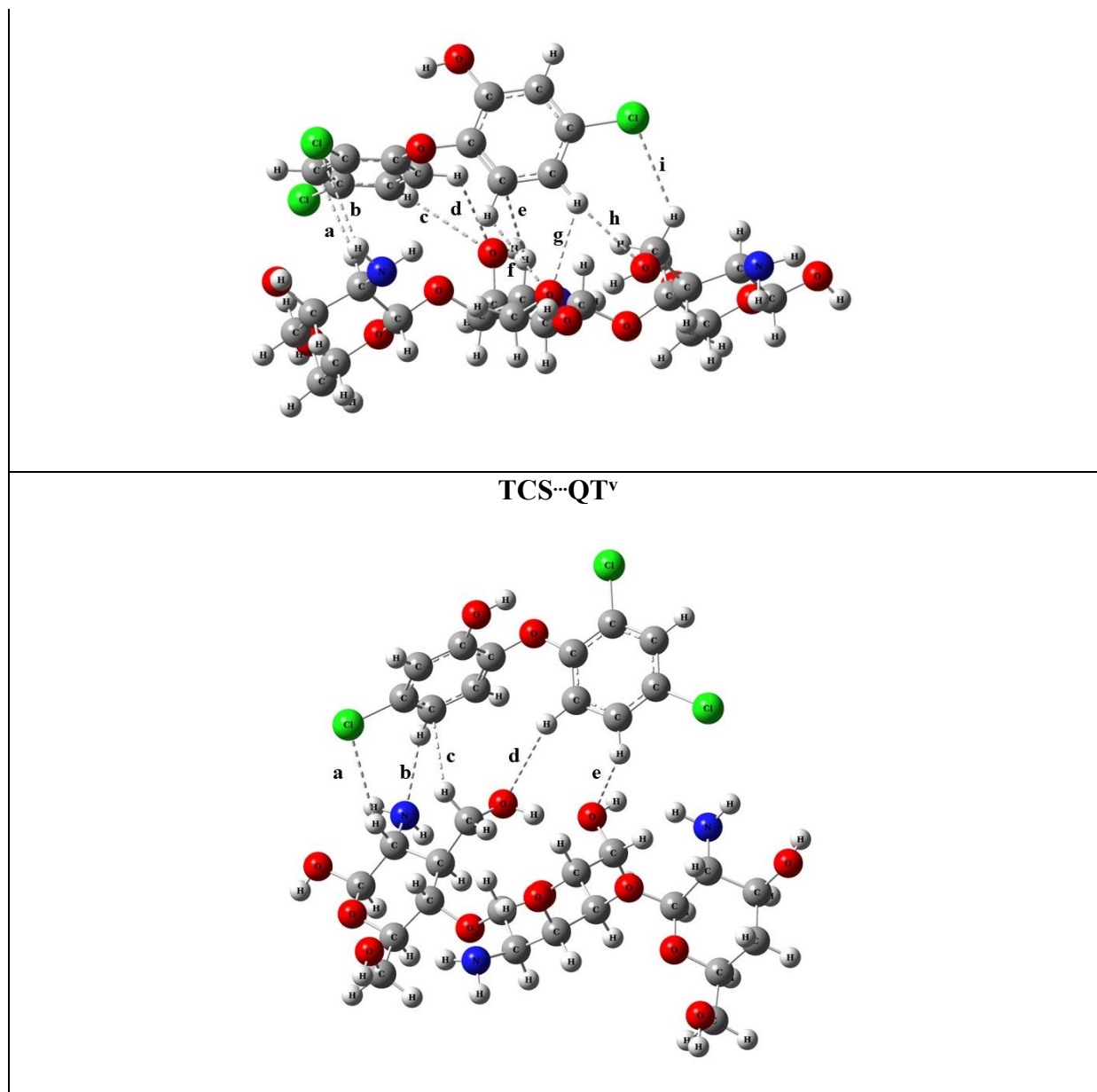
### 3.3 Propriedades Estruturais

Com os resultados dos MEP e FMOs, foi possível avaliar que diferentes possibilidades de interação TCS...QT podem ocorrer. Deste modo, diferentes hipóteses foram otimizadas e 5 complexos se mostraram estáveis. Os complexos estáveis foram denominados de TCS...QT<sup>i</sup>,

TCS...QT<sup>ii</sup>, TCS...QT<sup>iii</sup>, TCS...QT<sup>iv</sup>, TCS...QT<sup>v</sup> e estão representados na Figura 5 com as interações moleculares destacadas.

Figura 5: Configurações estruturais dos sistemas formados entre o Triclosan e a Quitosana para TCS...QT<sup>i</sup>, TCS...QT<sup>ii</sup>, TCS...QT<sup>iii</sup>, TCS...QT<sup>iv</sup> e TCS...QT<sup>v</sup>.





Fonte: Autora, 2025

Na Figura 5 foram representadas as possíveis interações que podem ocorrer entre a matriz adsortiva e o contaminante, e os resultados das distâncias de interação obtidos para cada sistema estão representados na Tabela 1, sendo que as distâncias de ligação extraídas da Tabela 1 foram organizadas conforme o tipo de interação:  $H\cdots O$ ,  $N\cdots H$ ,  $H\cdots Cl$  e  $H\cdots C$ . De maneira geral, foi possível analisar que os comprimentos de ligação variaram de 1,839 Å a 3,606 Å. As ligações de hidrogênio foram que apresentaram menor distâncias, ou seja, as mais fortes. A menor distância foi no sistema  $TCS\cdots QT^{iii}$  (1,839 Å) indicando uma ligação de hidrogênio forte. Outras interações  $H\cdots O$  foram observadas nos sistemas  $TCS\cdots QT^i$  (2,484 Å),  $TCS\cdots QT^{iv}$  entre (2,582 e 2,822 Å),  $TCS\cdots QT^v$  (2,529 Å) apresentaram maiores distâncias, características de ligações de hidrogênio moderadas.

Para as interações H $\cdots$ N observadas nos sistemas TCS $\cdots$ QT<sup>ii</sup> (2,578Å) e TCS $\cdots$ QT<sup>v</sup> (2,447 Å), os valores dessas distâncias indicam que essas ligações possuem intensidade moderada. As interações entre hidrogênios da QT e os átomos de Cloro do TCS foram observados em todos os sistemas, com a distâncias 2,963 Å a 3,606 Å. Essas interações são mais longas, portanto, consideradas fracas, compatíveis com interações eletrostáticas. E para a interação entre o hidrogênio da QT e o carbono do TCS (C $\cdots$ H), foram observadas em quase todos os sistemas com exceção do TCS $\cdots$ QT<sup>ii</sup>, as distâncias variaram de 2,593 Å a 3,143 Å, indicando que são interações fracas do tipo de Van der Waals.

Tabela 1: Análise estrutural das interações para os complexos formados entre o Triclosan e a Quitosana

Sistemas	Interações	Átomos	Distância (Å)
TCS $\cdots$ QT <sup>i</sup>	a	Cl95-H56	3,143
	b	Cl95-H38	2,963
	c	H89-O53	2,484
	d	C73-H51	2,724
	e	C76-H52	2,975
TCS $\cdots$ QT <sup>ii</sup>	a	Cl81-H13	3,606
	b	H80-N14	2,578
	c	Cl82-15	3,262
TCS $\cdots$ QT <sup>iii</sup>	a	H94-O58	1,839
	b	O83-H63	3,035
	c	C86-H68	3,143
	d	C85-H44	2,593
	e	O93-H44	2,681
	f	C87-H69	3,090
	g	C87-H25	2,930
	h	Cl95-H25	3,175
	i	H91-O39	2,541
TCS $\cdots$ QT <sup>iv</sup>	a	C76-H9	2,602
	b	Cl82-H16	3,103
	c	H78-O39	2,822
	d	H79-O39	2,815
	e	C86-H25	2,786

	f	H89-O32	2,776
	g	H92-O32	2,650
	h	H92-O70	2,582
	i	C195-H68	3,009
TCS...QT <sup>v</sup>	a	C195-H63	3,037
	b	H92-N64	2,447
	c	C88-H68	2,593
	d	H79-O70	3,074
	e	H78-O32	2,529

Fonte: Autora, 2025

### 3.4 Energia de ligação, Entalpia e Energia de Gibbs

Quando se avalia interações moleculares é importante analisar todos os parâmetros energéticos e termodinâmicos, para saber se o processo de adsorção é viável. Para verificar a força das interações, se processo é exotérmico ou endotérmico e espontâneo ou não, foram calculadas, respectivamente, as energias de ligação ( $\Delta E_{\text{Bind}}$ ), a variação de entalpia e a variação da energia de Gibbs, Tabela 2.

Tabela 2: Energias de interação eletrônica ( $\Delta E_{\text{Bind}}$ ) a 0 K, entalpia e energia de Gibbs ( $\Delta G$ ) a 298 K para os complexos estudados

Sistemas	$\Delta E_{\text{Bind}}$	$\Delta H$	$\Delta G$
	kcal mol <sup>-1</sup>		
TCS...QT <sup>i</sup>	-10,53	-10,34	4,57
TCS...QT <sup>ii</sup>	-4,14	-3,64	7,91
TCS...QT <sup>iii</sup>	-17,34	-16,90	-3,14
TCS...QT <sup>iv</sup>	-17,74	-17,13	-2,82
TCS...QT <sup>v</sup>	-8,98	-8,14	4,05

Fonte: Autora, 2025.

Analisando os resultados encontrados foi possível inferir que os valores de  $\Delta E_{\text{Bind}}$  para os sistemas mostraram que todos foram efetivos ( $\Delta E_{\text{Bind}} < 0$ ), as interações mais significativas foram dos sistemas TCS...QT<sup>iii</sup> e TCS...QT<sup>iv</sup> com os valores de energia de ligação -16,90 kcal·mol<sup>-1</sup> e -17,74 kcal·mol<sup>-1</sup> respectivamente. O maior número de interações observadas nos complexos TCS...QT<sup>iii</sup> e TCS...QT<sup>iv</sup>, justificam a maior energia de interação eletrônica ( $\Delta E_{\text{Bind}}$ )

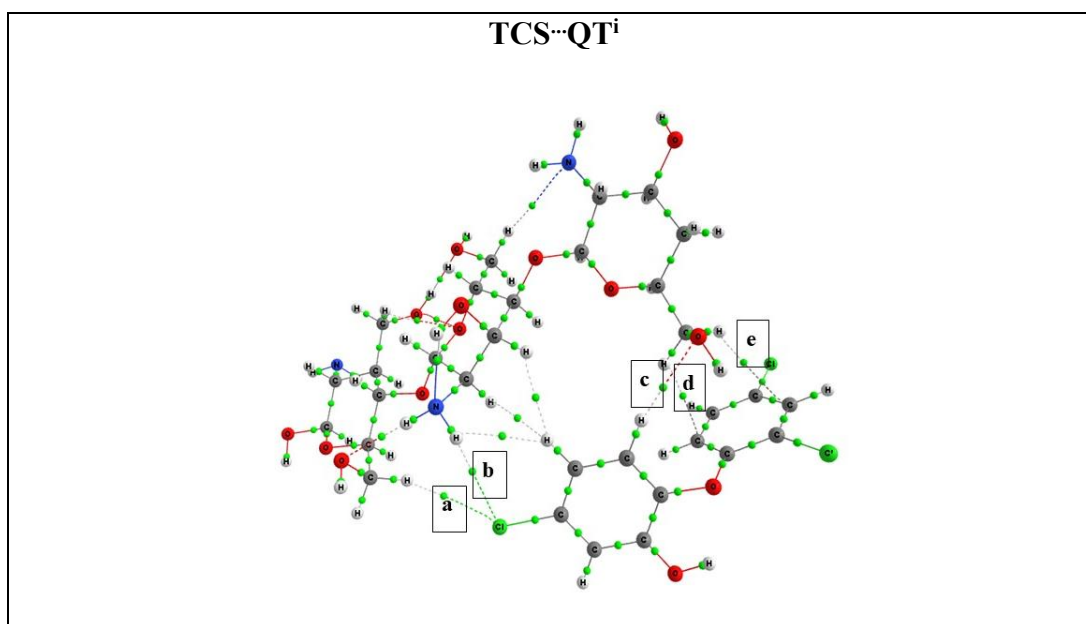
observada nestes complexos, sendo portanto os mais estáveis como apresentado na Tabela 2, e a interação com a menor intensidade foi a do complexo  $\text{TCS}\cdots\text{QT}^{\text{ii}}$  com valor de  $-4,14 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$  e foi o sistema que teve menor quantidade de interação entre o TCS e a QT.

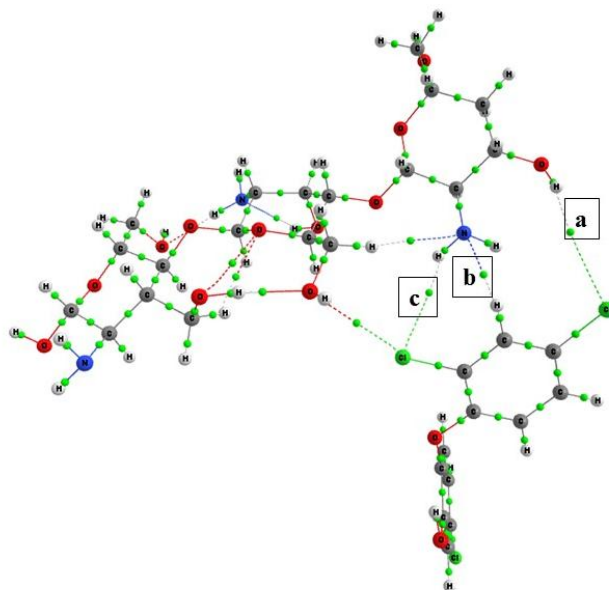
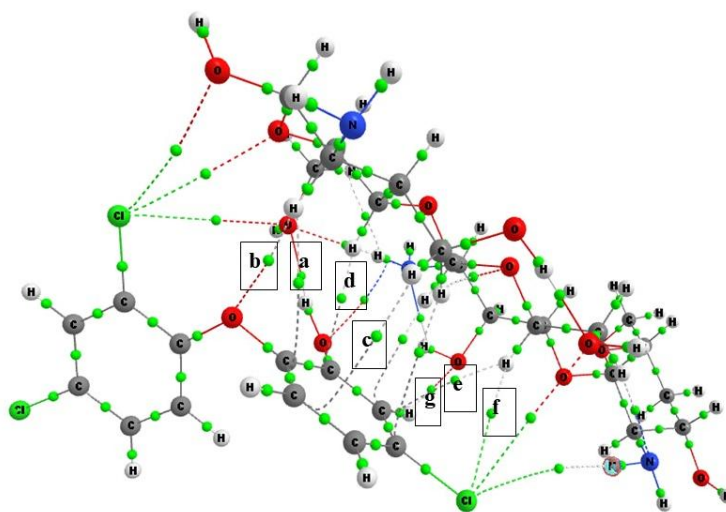
No processo de adsorção é fundamental analisar os parâmetros termodinâmicos, dados pela variação de entalpia e a variação da energia de Gibbs. Assim foi possível observar que a variação da entalpia de todos os complexos foi exotérmica, pois  $\Delta H < 0$ . Para a variação da energia de Gibbs, somente os  $\text{TCS}\cdots\text{QT}^{\text{iii}}$  e  $\text{TCS}\cdots\text{QT}^{\text{iv}}$  apresentaram valores de  $\Delta G$  abaixo de  $0 \text{ kcal mol}^{-1}$  o que indica que o processo foi espontâneo. Os complexos  $\text{TCS}\cdots\text{QT}^{\text{i}}$ ,  $\text{TCS}\cdots\text{QT}^{\text{ii}}$  e  $\text{TCS}\cdots\text{QT}^{\text{v}}$  apresentaram valores  $\Delta G$  maior que 0, logo estas formas de interações foram não espontâneas.

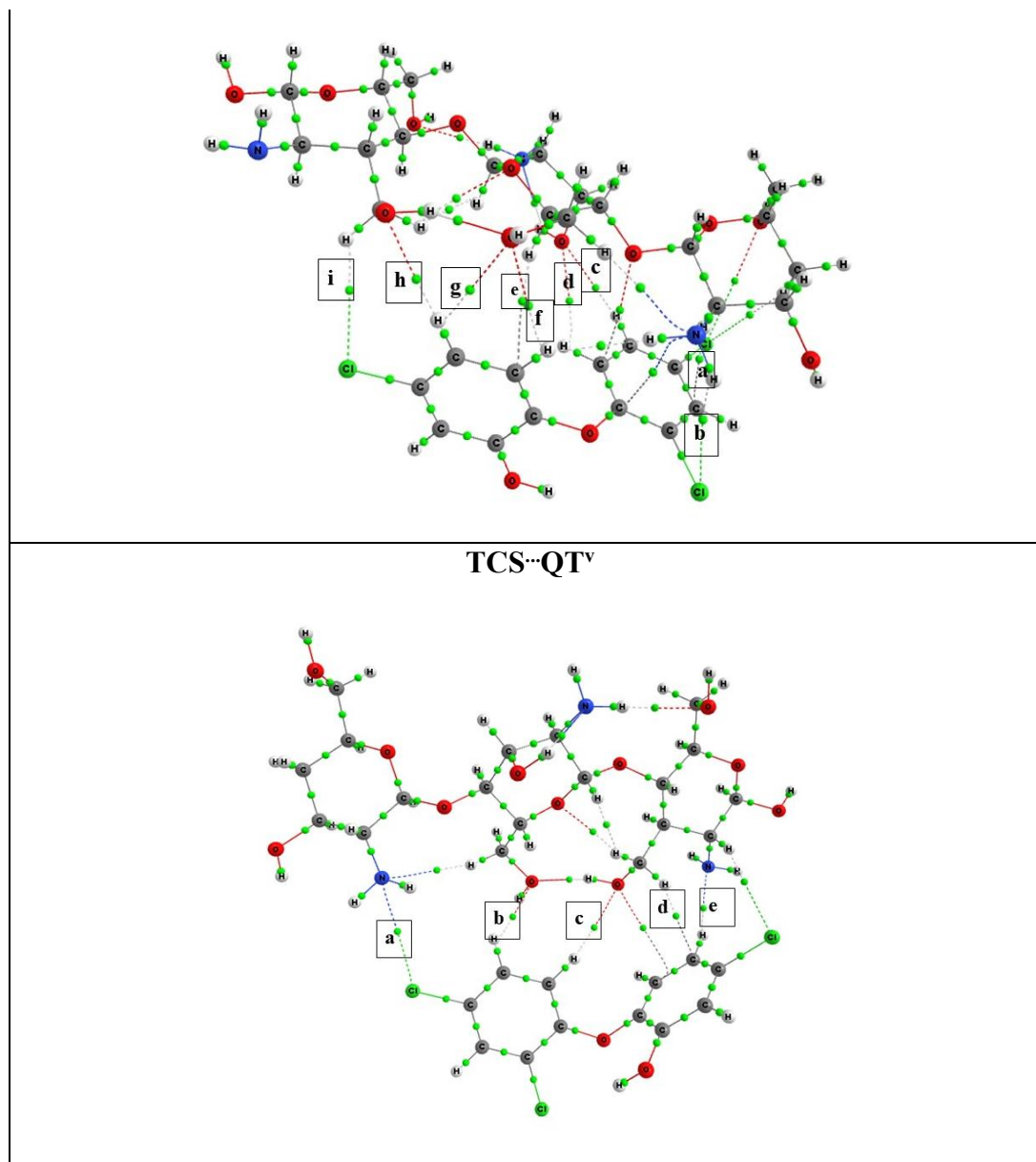
### 3.5 Teoria Quântica de Átomos em Moléculas (QTAIM)

A Teoria Quântica de Átomos em Moléculas (QTAIM) foi desenvolvida por Bader e utiliza propriedades topológicas para descrever a estrutura eletrônica das moléculas (Thomas et al., 2024). Os dados topológicos obtidos pela QTAIM permitem classificar as ligações químicas bem como as interações intra ou intermoleculares dos sistemas. Os gráficos moleculares gerados pela QTAIM com os respectivos pontos críticos de ligação entre o TCS e a QT estão representados na Figura 6 e os dados valores dos parâmetros expressos na Tabela 3.

Figura 6: Gráficos moleculares gerados pela QTAIM com destaque dos pontos críticos interação para os complexos  $\text{TCS}\cdots\text{QT}^{\text{i-v}}$



TCS...QT<sup>ii</sup>TCS...QT<sup>iii</sup>TCS...QT<sup>iv</sup>



Fonte: Autora, 2025.

Tabela 3: Parâmetros topológicos das interações entre o Triclosan e a Quitosana gerados pela QTAIM. Valores em au

Sistema	Interação	Átomos	$\rho(r)$	$\nabla^2\rho(r)$	$V(r)$	au	
						$G(r)$	$H(r)$
TCS...QT <sup>i</sup>	<b>a</b>	Cl95-H56	0,003407	0,011821	-0,0014	0,002177	0,000778
	<b>b</b>	Cl95-H38	0,005489	0,02048	-0,00265	0,003884	0,001235
	<b>c</b>	H89-O53	0,00967	0,02982	-0,0067	0,00709	0,00037
	<b>d</b>	C73-H51	0,007889	0,024889	-0,00378	0,005002	0,00122
	<b>e</b>	C76-H52	0,005083	0,016512	-0,0025	0,003313	0,000814
TCS...QT <sup>ii</sup>	<b>a</b>	Cl81-H13	0,00099	0,00414	-0,0004	0,00069	0,00034

	<b>b</b>	H80-N14	0,0091	0,03177	-0,0054	0,00667	0,00127
	<b>c</b>	Cl82-H15	0,00297	0,01164	-0,0014	0,00217	0,00074
<b>TCS...QT<sup>iii</sup></b>	<b>a</b>	H94-O58	0,030714	0,090788	-0,02275	0,022722	-2.4E-05
	<b>b</b>	O83-H63	0,002765	0,011629	-0,00156	0,002233	0,000675
	<b>c</b>	C86-H68	0,004168	0,012692	-0,00184	0,002508	0,000665
	<b>d</b>	C85-H44	0,008847	0,030247	-0,00482	0,006191	0,001372
	<b>e</b>	C87-H25	0,005063	0,017049	-0,0023	0,003281	0,000982
	<b>f</b>	Cl95-H25	0,003848	0,012747	-0,00171	0,00245	0,000737
	<b>g</b>	H91-O39	0,008517	0,02795	-0,00566	0,006322	0,000666
<b>TCS...QT<sup>iv</sup></b>	<b>a</b>	C76-H9	0,010118	0,032934	-0,00573	0,006982	0,001251
	<b>b</b>	Cl82-H16	0,003878	0,015306	-0,00193	0,002879	0,000947
	<b>c</b>	H78-O39	0,0052	0,021225	-0,00306	0,004185	0,001121
	<b>d</b>	H79-O39	0,005058	0,021137	-0,00304	0,004162	0,001122
	<b>e</b>	C86-H25	0,006356	0,020801	-0,003	0,004101	0,001099
	<b>f</b>	H89-O32	0,005646	0,022975	-0,00358	0,00466	0,001085
	<b>g</b>	H92-O32	0,007102	0,026929	-0,00461	0,005673	0,001059
	<b>h</b>	H92-O70	0,008081	0,025208	-0,00526	0,005782	0,00052
	<b>i</b>	Cl95-H68	0,005689	0,018968	-0,00253	0,003635	0,001108
<b>TCS...QT<sup>v</sup></b>	<b>a</b>	Cl95-H63	0,005274	0,016765	-0,00231	0,003252	0,000939
	<b>b</b>	H92-N64	0,013362	0,032676	-0,00831	0,008237	-6.9E-05
	<b>c</b>	C88-H68	0,009361	0,029729	-0,00494	0,006186	0,001246
	<b>d</b>	H79-O70	0,002613	0,010696	-0,00121	0,001943	0,000731
	<b>e</b>	H78-O32	0,009564	0,03537	-0,00653	0,007684	0,001159

Fonte; Autora, 2025

Pela QTAIM é possível afirmar que quando a  $\nabla^2\rho(r) > 0$  e o valor de densidade eletrônica ( $\rho(r)$ ) foram pequenos ( $< 0.1$  au) trata-se de uma interação não covalente. Assim, analisando os resultados para os complexos foi possível inferir que todas os BCPs destacados são realmente interações moleculares.

As interações moleculares também podem ser classificadas utilizando os parâmetros  $\nabla^2\rho(r)$  e  $H(r)$ . Quando  $\nabla^2\rho(r) > 0$  e  $H(r) < 0$  a interação é classificada como parcialmente covalente, e quando  $\nabla^2\rho(r) > 0$  e  $H(r) > 0$  é classificada como eletrostática (Asif et al., 2024; Asogwa et al., 2024; Bihain et al., 2022; Singh, 2024). Todas as interações dos complexos TCS...QT se mostraram eletrostáticas com exceção de duas interações as quais são: interação

“a” do complexo TCS...QT<sup>iii</sup> e interação “b” do complexo TCS...QT<sup>v</sup>, as quais são parcialmente covalentes.

Pelos resultados da QTAIM, também é possível quantificar as energias das ligações de hidrogênios ( $E_{HB}$ ) da interação no ponto crítico de ligação pela equação 6.

$$E_{HB} = 1/2 |V(r)|_{BCP} \quad (6)$$

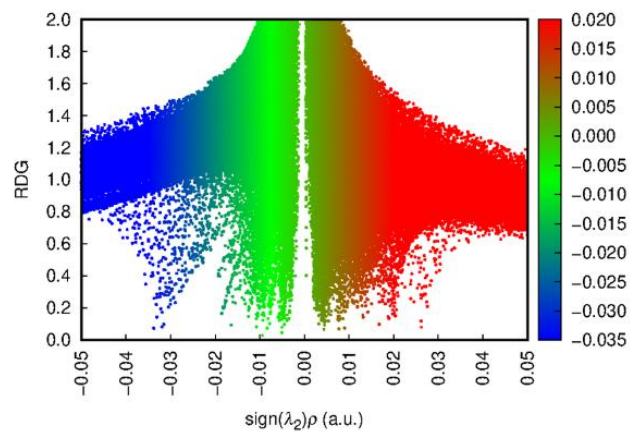
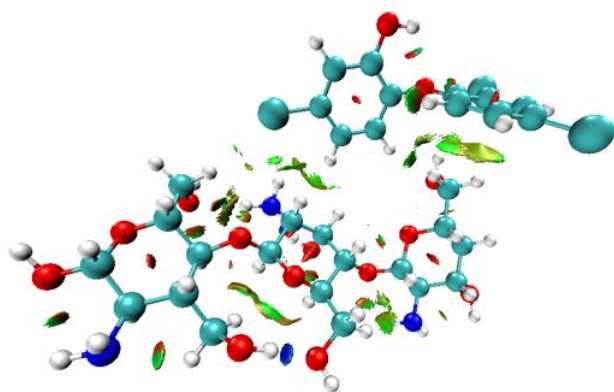
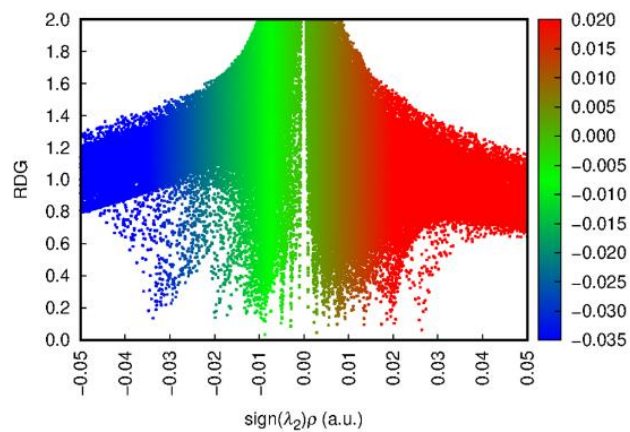
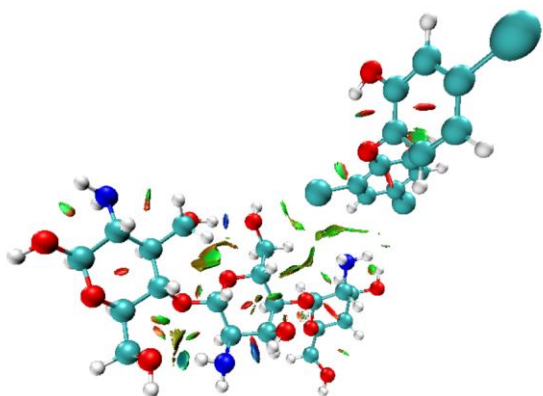
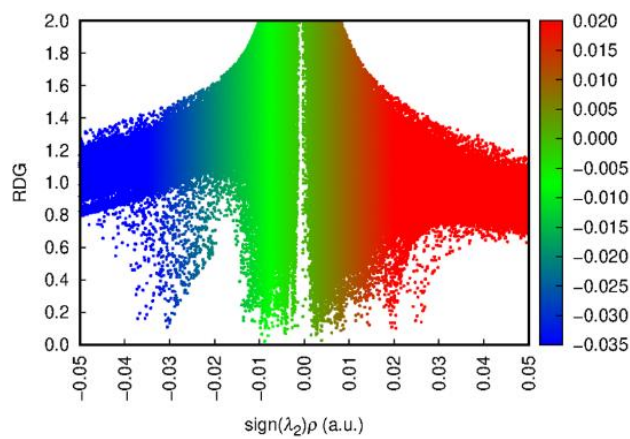
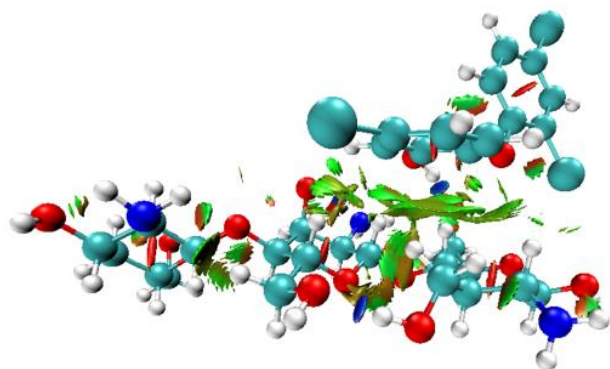
Os valores das energias das Ligações de hidrogênio encontradas para as interações variaram de 0,7 kcal mol<sup>-1</sup> (TCS...QT<sup>iv</sup>, interação d) até 14,28 kcal mol<sup>-1</sup> (TCS...QT<sup>iii</sup>, interação “b”).

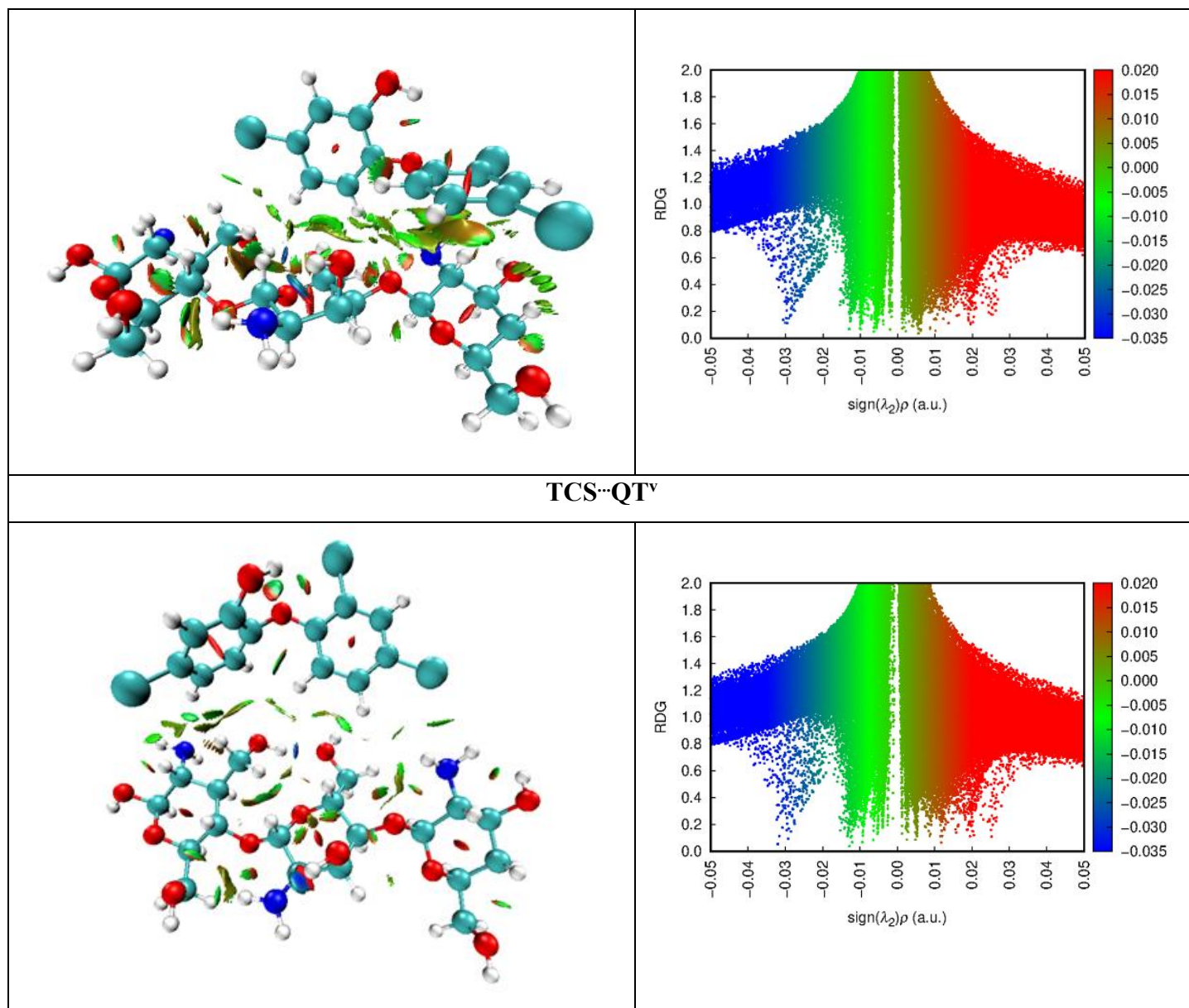
### 3.6 Interações Não Covalentes (NCI)

A Interação Não Covalente (NCI) é uma ferramenta utilizada para entender as interações que ocorrem em moléculas, e possibilita expandir os resultados obtidos pelo QTAIM (Kores et al., 2021). Assim, todos os sistemas foram avaliados pela NCI e os resultados estão representados na Figura 7. Para analisar as interações, dois parâmetros são avaliados: a densidade eletrônica de picos ( $\lambda_2$ ) e a densidade eletrônica ( $\rho(r)$ ), em que, esses parâmetros fornecem informações da força e do tipo de interação (Chakraborty 2022). Interações com valores de  $\text{sign}(\lambda_2)\rho \ll 0$ , indica ligação de hidrogênio ou uma interação atrativa; interações com valores de  $\text{sign}(\lambda_2)\rho$  próximos ou igual a zero, são descritas como de Van der Waals e interações com valores de  $\text{sign}(\lambda_2)\rho \gg 0$ , descrevem repulsão estérica. Além disso, foi possível saber o tipo de interação através da codificação de cores: ligações de Hidrogênio ou interações atrativas são representadas pela cor azul, de Van der Waals são representadas pela cor verde e repulsões estéricas são representadas pela cor avermelhada, e quanto mais escura é a cor, mais forte será a interação (Gholivand et al., 2022).

Figura 7: Gráficos de interação não covalente 3D (esquerda) e gráficos 2D (direita) do gradiente da densidade versus densidade eletrônica multiplicada pelo o sinal do auto valor do segundo Hessiano para complexos TCS...QT<sup>i-v</sup>

TCS...QT<sup>i</sup>

TCS...QT<sup>ii</sup>TCS...QT<sup>iii</sup>TCS...QT<sup>iv</sup>



Fonte: Autora, 2025

Analisando os resultados da Figura 7 é possível observar que a cor verde predomina entre as interações Triclosan - Quitosana indicando interações de Van Der Waals. Os picos do RDG variam aproximadamente entre -0,01a.u. e 0,00 a.u., estando dentro dos padrões que configuram valores de interação de Van der Waals. Todos os sistemas apresentam esferas vermelhas no centro dos anéis aromáticos, o que representa o efeito estérico. Apenas o sistema 4 apresentou uma esfera azulada entre o adsorvato-adsorventes indicando uma ligação de hidrogênio forte para este complexo.

#### 4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Cálculos teóricos baseados na teoria do funcional da densidade evidenciaram que o Triclosan pode interagir com a matriz de quitosana. A análise dos parâmetros estruturais

demonstrou que ocorreram interações entre o adsorvente-adsorvato e os comprimentos de ligação das interações variaram de 1,839 Å a 3,606 Å.

As análises enérgicas mostraram que o processo é efetivo, a entalpia da reação indicou um processo exotérmico e dois complexos apresentaram energia de Gibbs  $< 0$ , logo espontâneos. A análise topológica QTAIM evidenciou que quase todas as interações são eletrostáticas e as análises NCI mostraram que as interações são fracas e do tipo van der Waals para todos os complexos. Por fim, considerando os bons resultados das simulações é possível inferir que a matriz de QT é uma boa alternativa para uso em remediação ambiental, especialmente para águas contaminadas por Triclosan, permitindo assim sua aplicação em estudos experimentais futuros.

#### 4.1 CONTRIBUIÇÕES DA DISSERTAÇÃO

Durante o período da execução do atual projeto foi possível a participação em eventos científicos. Dentre os eventos científicos, publicações e submissão tem- se:

- Participação na 9º Semana Integrada de Ciências e Tecnologia (SICTEG) na cidade de Gurupi/TO, contabilizando carga horária total de 40 horas.
- Participação na 10º Semana Integrada de Ciências e Tecnologia (SICTEG) – Gurupi Tech na cidade de Gurupi/TO, contabilizando carga horária total de 24 horas.
- Participação na palestra "Falando de Ética na Pesquisa Científica", ministrado pela Profa. Dra. Solange Cadore (UNICAMP), promovido pelo Programa de Pós-graduação em Química da Universidade Federal do Tocantins, Câmpus de Gurupi. Totalizando 2 horas.

#### Artigos Publicados

- Bihain, R. F. M. Silva, S. T. Santos, F.R. Teixeira, C. C. Pereira, H. D. Theoretical eveluation of  $17\beta$ -estradiol  $\alpha$ -ethinyl estradiol adsorption on reduced graphene oxide: Interactions, bonds and energies. **Computational and Theoretical Chemistry** p. 1-10, jan 2025.
- Teixeira, C. C. Pereira, S. K. A. Cavallini, S. G. Pereira, H. D. Triclosan Adsorption on Chitosan: Computational Study of Molecular Interactions and Potential for Environmental Remediation. **Polymers**, v. 17, n. 4, p. 1-15. jan. 2025.

## REFERÊNCIAS

- Abbasi, A. et al. A review on remediation of dye adulterated system by ecologically innocuous “biopolymers/natural gums-based composites”. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 231, p. 123240., mar 2023.
- Abdullah, N. H. et al. Solid matrices for fabrication of magnetic iron oxide nanocomposites: Synthesis, properties, and application for the adsorption of heavy metal ions and dyes. **Composites Part B: Engineering**, v. 162, p. 538–568, abr. 2019.
- Asif, M. S. et al. Sensing Performance of Heptazine-Based C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> Quantum Dot Toward Highly Toxic Environmental Pollutants, Amides, and Acetyl Derivatives, **J Inorg Organomet Polym** 34 p.79–92, 2024.
- Asogwa, F. C, et al. Adeyinka, Adsorption profiles of chlorinated industrial gases on metal (Cu, Mn and Ni) doped fullerenes using DFT, QAIM and NCI analysis, *Chem. Pap.* 78 1303–1316, 2024.
- Azevedo, V. V. C. et al. Quitina e Quitosana: aplicações como biomateriais. **Revista Eletrônica de Materiais e Processos**. v. 2, p. 27-34, nov. 2007.
- Akichouh, E. H. et al. Organo cationic dyes adsorption on charged nano-clay: Revealing dual mechanisms through GCS modeling and DFT molecular simulations. **Journal of Molecular Liquids**, v. 414, p. 126070, 15 nov. 2024.
- Atkins, P. W. e Friedman, R. S. *Molecular Quantum Mechanics*. 3a edição. Oxford: Oxford University Press, 2008.
- Biglari, N.; Salehi, E. A short review on polysaccharide-based nanocomposite adsorbents for separation and biomedical applications. **International Journal of Biological Macromolecules**, 1 a. v. 301, p. 140352, abril 2025.
- Bihain, M.F. R, et al. Theoretical insights into the possibility of removing CH<sub>3</sub>Hg<sup>+</sup> using different adsorptive matrices: g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, cellulose xanthate, and vanillin-derived modified monomer, *J Mol Liq* 361 (2022).
- Biswas, S.; Pal, A. Application of biopolymers as a new age sustainable material for surfactant adsorption: A brief review. **Carbohydrate Polymer Technologies and Applications**, v. 2, p. 100-145, dez. 2021.
- Biswas, U. K. et al. An insight into chemically modified chitosan and their biological, pharmaceutical, and medical applications: A review. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 303, p. 140612, abr 2025.
- Bracamontes-Ruelas, A. R. et al. Evaluation of the presence of emerging contaminants in a municipal wastewater treatment plant in Durango, Mexico. *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*, v. 11, p. 101-218. jun. 2025.
- Chai, J.-D.; Head-Gordon, M. Long-range corrected hybrid density functionals with damped atom–atom dispersion corrections. **Physical Chemistry Chemical Physics**. v. 10, n. 44, p. 15-66, 2008.

- Chakraborty, J. An account of noncovalent interactions in homoleptic palladium(II) and platinum(II) complexes within the DFT framework: A correlation between geometries, energy components of symmetry-adapted perturbation theory and NCI descriptors. *Heliyon*, v. 8, n. 11, p. e11408, 1 nov. 2022.
- Dabrowski. Adsorption - from theory to practice. *Advances in Colloid and Interface Science*, v. 93, n. 1-3, p. 135-224, maio. 2001.
- Das, A.; et al. Chitosan biopolymer and its composites: Processing, properties and applications- A comprehensive review. **Hybrid Advances**, 1 ago. 2024. v. 6, p. 100265, ago 2024.
- Dennington, R; A. Keith, Todd; M. Millam, John. GaussView, Versão 6. In: GaussView, Semichem Inc., Shawnee Mission, KS, 2019.
- Dias, K. B. et al. Quitina e quitosana: Características, utilizações e perspectivas atuais de produção. **Journal of Biotechnology and Biodiversity**, v. 4, n. 3, p. 184–191, nov. 2013.
- Do, D. D. Adsorption analysis: Equilibria and Kinetics. London: Imperial College Press, 1998.
- Elwakeel, K. Z. et al. Hybrid adsorbents for pollutants removal: A comprehensive review of chitosan, glycidyl methacrylate and their composites. **Journal of Molecular Liquids**, v. 426, p. 127262., maio. 2025.
- El Messaoudi, N. et al. A critical review of Allura Red removal from water: Advancements in adsorption and photocatalytic degradation technologies, and future perspectives. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, v. 12, n. 6, p. 114-843, dez. 2024.
- Espinosa, E.; Molins, E.; Lecomte, C. Hydrogen bond strengths revealed by topological analyses of experimentally observed electron densities. **Chemical Physics Letters**, v. 285, n. 3, p. 170–173, 20 mar. 1998.
- Fakhri, V. et al. Polysaccharides as eco-friendly bio-adsorbents for wastewater remediation: Current state and future perspective. **Journal of Water Process Engineering**, v. 54, p. 103980. ago 2023.
- Frisch, M.J et al. Gaussian 16, Revisão C.01, 2016.
- García-Rollán, M. et al. Key adsorbents and influencing factors in the adsorption of micro- and nanoplastics: A review. **Journal of Environmental Management**, v. 383, p. 1-24, maio 2025.
- Gholivand, K. et al. Synthesis, characterized, QSAR studies and molecular docking of some phosphonates as COVID-19 inhibitors. *Polyhedron*, v. 221, p. 115824. jul. 2022
- Hamid, M. et al. Chitosan/CNDs coated Cu electrode surface has an electrical potential for electrical energy application. **South African Journal of Chemical Engineering**, v. 50, p. 445–450. out. 2024.
- Hamidon, T. S. et al. Biopolymer-based beads for the adsorptive removal of organic pollutants from wastewater: Current state and future perspectives. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 269, p. 131759, jun 2024.

Hassan, B. et al. Uma análise baseada em DFT da adsorção do íon Hg 2+ no monômero de quitosana e seus derivados de citralideno e salicilideno: antes da remoção da toxicidade do Hg. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 99, p. 549–554, jun. 2017.

Heryanto, H. et al. Carbon as a multifunctional material in supporting adsorption performance for water treatment: Science mapping and review. *Desalination and Water Treatment*, v. 320, p. 100758, out 2024.

Hu, D. et al. A critical review on ultrasound-assisted adsorption and desorption technology: Mechanisms, influencing factors, applications, and prospects. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, v. 12, n. 6, p. 114-307, dez. 2024.

Humphrey, H. A. Dalke, K. Schulten, VMD: Visual molecular dynamics, **Journal of Molecular Graphics**, 1996.

Jiang, Y. et al. Critical review on the environmental behaviors and toxicity of triclosan and its removal technologies. **Science of The Total Environment**, v. 932, p. 1-15, jul. 2024.

Keshvardoostchokami, M. et al. A review on the use of chitosan and chitosan derivatives as the bio-adsorbents for the water treatment: Removal of nitrogen-containing pollutants. *Carbohydrate Polymers*, v. 273, p. 118625, dez 2021.

Kores, J. J. et al. Spectral, NBO, NLO, NCI, aromaticity and charge transfer analyses of anthracene-9,10-dicarboxaldehyde by DFT. *Heliyon*, v. 7, n. 11, p. e08377, 1 nov. 2021.

Kumar, M. et al. Remediation strategies for heavy metals contaminated ecosystem: A review. *Environmental and Sustainability Indicators*, v. 12, p. 100155, dez. 2021.

Kumar, S. et al. A review on chitosan and chitosan-based bionanocomposites: Promising biological macromolecules for sustainable corrosion inhibition. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 301, p. 140392. abr. 2025.

Lee, J.-S. et al. Acute toxicity, oxidative stress, and apoptosis due to short-term triclosan exposure and multi- and transgenerational effects on in vivo endpoints, antioxidant defense, and DNA damage response in the freshwater water flea *Daphnia magna*. **Science of The Total Environment**, v. 864, p. 160925, mar. 2023.

Lee, J.-S.; et al. Toxic effects of triclosan in aquatic organisms: A review focusing on single and combined exposure of environmental conditions and pollutants. **Science of The Total Environment**, v. 920, p. 1-15, abr. 2024.

Li, C. et al. The pH-dependent toxicity of triclosan to five aquatic organisms (*Daphnia magna*, *Photobacterium phosphoreum*, *Danio rerio*, *Limnodrilus hoffmeisteri*, and *Carassius auratus*). **Environmental Science and Pollution Research International**, v. 25, n. 10, p. 9636–9646, abr. 2018.

Liu, Z.; you, X. Recent progress of microplastic toxicity on human exposure base on in vitro and in vivo studies. **Science of The Total Environment**, v. 903, p. 166-766, dez. 2023.

Lu, T.; Chen, F. Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer. **Journal of Computational Chemistry**, v. 33, n. 5, p. 580–592, 15 fev. 2012.

- Mallik, A. K. et al. Cu(II) removal from wastewater using chitosan-based adsorbents: A review. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, v. 10, n. 4, p. 108048, ago. 2022.
- Medellín-Castillo, N. A. et al. Efficient removal of triclosan from water through activated carbon adsorption and photodegradation processes. **Environmental Research**, v. 246, p. 118-162, abr. 2024.
- Mei, Y et al. Adsorption of heavy metals by biochar in aqueous solution: A review. v. 969, p. 1-18, mar 2025.
- Marenich, A. V. Cramer, C.J Truhlar, D. G. Universal Solvation Model Based on Solute Electron Density and on a Continuum Model of the Solvent Defined by the Bulk Dielectric Constant and Atomic Surface Tensions, *J. Phys. Chem. B.* 113 2009.
- Morgon, N, H. Coutinho, K. Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular. 1ª edição. São Paulo: Livraria da Física, 2007.
- Muller, C. L. et al. Methylene blue adsorption in *Pinus elliottii* (pine) and *Drepanostachyum falcatum* (bamboo) sawdust. *Engenharia Sanitária Ambiental*. Jul 2019.
- Nandini, T. et al. A review-chitosan nanoparticles towards enhancing nutrient use efficiency in crops. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 306, p. 141433, maio 2025.
- Nathanael, R. J.; et al. The last decade epidemiologic concern of drinking water contaminants of emerging concern (CECs) in Asian Countries: A scoping review. *Heliyon*, v. 10, n. 20, p. 1-21, out 2024.
- Nascimento, R. F. Do. Adsorção: Imprensa Universitária - Universidade Federal do Ceará, 2020.
- Nie, E. et al. Effects of reduced graphene oxide nanomaterials on transformation of <sup>14</sup>C-triclosan in soils. **Science of The Total Environment**, v. 946, p. 173-858, out. 2024.
- Nugraha, M. W. et al. A review of the recent advancements in adsorption technology for removing antibiotics from hospital wastewater. **Journal of Water Process Engineering**, v. 70, p. 106-960, fev. 2025.
- Olaniyan, L. W. B.; Mkwetshana, N.; Okoh, A. I. Triclosan in water, implications for human and environmental health. *SpringerPlus*, v. 5, n. 1, p. 16-39, set. 2016.
- Park, J. C. et al. Effects of triclosan (TCS) on fecundity, the antioxidant system, and oxidative stress-mediated gene expression in the copepod *Tigriopus japonicus*. *Aquatic Toxicology*, v. 189, p. 16–24, 1 ago. 2017.
- Pakizeh, M.; Moradi, A.; Ghassemi, T. Chemical extraction and modification of chitin and chitosan from shrimp shells. **European Polymer Journal**, v. 159, p. 110709, out, 2021.
- Petersson, A; G. et al., A complete basis set model chemistry. I. The total energies of closed-shell atoms and hydrides of the first-row elements, **The Journal of Chemical Physics**. V. 89, 1988.

- Petersson, G. A.; Al-Laham, M. A. A complete basis set model chemistry. II. Open-shell systems and the total energies of the first-row atoms. **The Journal of Chemical Physics**, v. 94, n. 9, p. 6081–6090, maio 1991.
- Pourhakkak, P. et al. Chapter 1 - Fundamentals of adsorption technology. Em: GHAEDI, M. Interface Science and Technology. Adsorption: Fundamental Processes and Applications, v. 33, p. 1–70, 2021.
- Karimi-Maleh, H. et al. Recent advances in using of chitosan-based adsorbents for removal of pharmaceutical contaminants: A review. **Journal of Cleaner Production**, v. 291, p. 125880. abr. 2021.
- Rebello, S. et al. Chitosan a versatile adsorbent in environmental remediation in the era of circular economy-a mini review. **Sustainable Chemistry and Pharmacy**, v. 32, p. 101004, maio. 2023.
- Rishika, M. S. et al. Performance evaluation of sugarcane bagasse biochar based fixed bed column for removal of triclosan from aqueous solution in presence of humic acid: Mechanism, kinetics and safety. **Journal of Water Process Engineering**, v. 64, p. 105-672, jul. 2024.
- Saiyad, M. et al. Modified biopolymers in wastewater treatment: A review. **Materials Today: Proceedings**, jan. 2024.
- Schütz, T. et al. Cadmium adsorption on manganese modified bentonite and bentonite–quartz sand blend. **International Journal of Mineral Processing**, v. 150, p. 32–38, maio 2016.
- Singh, H. A DFT insight into structure, NBO, NCI, QTAIM, vibrational, and NLO properties of cationic amino acid ionic liquid [Pro-H]<sup>+</sup>BF<sub>4</sub><sup>-</sup>, *Struct Chem* v.35 p. 471–483, 2024.
- Sucheta, M. et al. Frontier molecular orbital, molecular structure and Thermal properties of 2,4,6,8-tetramethyl-2,3,6,7-tetrahydro-s-indacene-1,5-dione using DFT calculation. *Materials Today: Proceedings, International Conference on Emerging Trends in Material Science and Technology-2022*. v. 62, p. 5241–5244, 1 jan. 2022.
- Tang, H. et al. Combined experimental and theoretical studies on adsorption mechanisms of gaseous mercury(II) by calcium-based sorbents: The effect of unsaturated oxygen sites. **Science of The Total Environment**, v. 656, p. 937–945, mar. 2019.
- Tan, I. A. et al. . Equilibrium and kinetic studies on basic dye adsorption by oil palm fibre activated carbon. **Chemical Engineering Journal**, v. 127, n. 1–3, p. 111–119, mar. 2007.
- Vo, T. S. et al. A comprehensive review of chitosan-based functional materials: From history to specific applications. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 281, p. 136-243, nov. 2024.
- Xiang, H. et al. Enhanced recovery of germanium (IV) from zinc residue leachate by tartaric acid functionalized chitosan: Experiments and DFT calculation. **Hydrometallurgy**, v. 221, p. 106-121, ago. 2023.
- Xiang, X. et al. Um novo biochar composto de Fe Ca modificado preparado para adsorção aprimorada de Cd: cálculo experimental, DFT e revelação do mecanismo. **Journal of Water Process Engineering**, v. 68, p. 106-565, dez. 2024.

Yao, T. et al. Preparation of  $\beta$ -cyclodextrin-reduced graphene oxide aerogel and its application for adsorption of herbicides. **Journal of Cleaner Production**, v. 468, p. 109-143, ago. 2024.

Yang, X.; et al. Antibacterial and antioxidant properties of phenolic acid grafted chitosan and its application in food preservation: **A review. Food Chemistry**, v. 428, p. 136788, dez. 2023

Yoon, S. et al. Adsorption behavior of triclosan on microplastics and their combined acute toxicity to *D. magna*. **Science of The Total Environment**, v. 880, p. 163-290, jul. 2023.

Yu, Z. et al. Biofilm enhances the interactive effects of microplastics and oxytetracycline on zebrafish intestine. **Aquatic Toxicology**, v. 270, p. 106-905, maio 2024.

Zhang, M. et al. Cell-free hemoglobin and hemin catalyzing triclosan oxidative coupling in plasma: A novel exogenous phenolic pollutants coupling pathway. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, v. 282, p. 116-708, set. 2024.

Zhang, D. et al. Multi-mechanism synergistic adsorption of lead and cadmium in water by structure-functionally adapted modified biochar: A review. *Desalination and Water Treatment*, v. 322, p. 1-24, abr. 2025.

Zhou, Z. et al. Dissolved black carbon incorporating with ferric minerals promoted photo-Fenton-like degradation of triclosan in acidic conditions. **Journal of Hazardous Materials**, v. 459, p. 132-253, out. 2023.

Zola, R. S. Estudo de Adsorção-Dessorção: Equação Cinética e Efeito Memória, 2007.