

A presença de fármacos no meio-ambiente – oriundos de sua utilização em humanos e animais – representa um potencial poluente. A eliminação inadequada desses fármacos no meio-ambiente, bem como a de seus metabólitos ativos, pode gerar efeitos desconhecidos. Porém, esses fármacos em matrizes ambientais, que são extremamente complexas, encontram-se em concentrações muito baixas, em nível de traços. A grande complexidade da matriz aliada à baixa concentração dos analitos faz com que seja necessário um pré-tratamento da amostra visando pré-concentrar os analitos e eliminar os interferentes. Pensando nisso, o projeto de pesquisa visa sintetizar e caracterizar materiais dotados de impressão molecular de fármacos, que serão utilizados para pré-concentrar amostras de matrizes ambientais. No presente trabalho será apresentado um estudo piloto do efeito da natureza dos fármacos sobre as propriedades texturais das sílicas com e sem impressão molecular. Para analisar as propriedades texturais das sílicas sintetizadas pelo método sol-gel, utilizaram-se duas técnicas. A primeira delas foi a adsorção de nitrogênio (método BET) que nos permite calcular a área específica das sílicas e também o diâmetro de poro, permitindo uma comparação dessas duas características entre os materiais com e sem impressão molecular para avaliar se a inclusão do fármaco altera a estrutura e se a extração do fármaco está ocorrendo com ou sem colapso da estrutura da sílica. A outra técnica utilizada foi o espalhamento de raios X em baixo ângulo (SAXS) para avaliação da estrutura multi-escala de partículas fractais. Esta técnica investiga as diferenças nas densidades eletrônicas do material através do perfil de intensidade de espalhamento de raios X. No presente trabalho, o efeito da impressão molecular dos fármacos: fluoxetina, gentamicina, lidocaína, morfina, nifedipino, paracetamol e tetraciclina em sílica, através do método sol-gel, na estrutura fractal e raio de giro das partículas foi investigado. Através do estudo realizado pode-se concluir que todos os sistemas produziram sílica com área específica superior à da sílica (branco), indicando que o fármaco está afetando as propriedades texturais da sílica gerada. Após extração com ultrassom, todos os sistemas exibiram aumento de área específica, na faixa de 200 a 740%. Esse aumento é devido à formação das cavidades oriundas da impressão molecular, a partir da liberação dos poros pelas moléculas dos fármacos. A análise dos dados de SAXS com relação ao nível da lei das potências nos permite concluir que a maioria dos sistemas com fármacos têm $\alpha = 4,0$ e, por essa razão, são formados por partículas primárias descritas como núcleos densos com superfície perfeitamente uniforme. Com a remoção do fármaco, as partículas primárias tornam-se fractais de superfície, dando origem a agregados constituídos por núcleos densos com superfície rugosa. Logo, o processo de extração para esses sistemas provoca alterações tanto no tamanho da partícula primária, quanto na sua morfologia. Em suma, o processo de extração com ultrassom não acarretou colapso na estrutura interna da sílica.