

## ESTUDO DA CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL, MORFOLÓGICA, ÓPTICA E DA FITOTOXICIDADE DO COMPÓSITO CDS-RHA NA DEGRADAÇÃO DO METRONIDAZOL.

### A STUDY OF STRUCTURAL, MORPHOLOGICAL, OPTICAL CHARACTERIZATION AND PHYTOTOXICITY OF CDS-RHA COMPOSITE TO METRONIDAZOLE DEGRADATION.

Aimée G. J. Brito<sup>1\*</sup>, Kallyandra Amorim<sup>3</sup>, Willams A. S. Albuquerque<sup>2</sup>, Rodrigo P. Feitosa<sup>1</sup>, Josy A. O. Furtini<sup>1</sup>, Ramón R. Peña-Garcia<sup>1,2,3</sup>.

1 - Programa de Pós Graduação em Ciências e Engenharia de Materiais – PPGCM, Universidade Federal do Piauí (UFPI), Teresina, PI, Brasil.

2- Departamento de Ciência dos Materiais, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE, Brasil.

3 – Programa de Pós- Graduação em Engenharia Física, Unidade Acadêmica do Cabo de Santo Agostinho, Universidade Federal Rural de Pernambuco, Cabo de Santo Agostinho, PE, Brasil.

[aimeejeronimo@gmail.com](mailto:aimeejeronimo@gmail.com)

## RESUMO

Os compósitos obtidos a partir de cinzas de resíduos industriais têm despertado crescente interesse devido às suas amplas aplicações, destacando-se, entre elas, a remediação ambiental [1-4]. A análise estrutural revelou interações significativas entre os componentes. Como objetivo, este estudo teve a síntese de um compósito baseado na incorporação de sulfeto de cádmio (CdS) em cinzas de casca de arroz (RHA), visando a remoção fotocatalítica do fármaco metronidazol em meio aquoso. As propriedades estruturais evidenciaram interações significativas entre os constituintes do compósito. A análise morfológica confirmou a formação do material híbrido, com distribuição homogênea das partículas de CdS na superfície da RHA. A caracterização óptica indicou que a incorporação do CdS na matriz de RHA resultou em materiais com bandgap de 2,413 eV, 2,434 eV e 2,434 eV, para as razões molares CdS:RHA de 1:1, 1:2 e 1:3, respectivamente, além de introduzir defeitos estruturais típicos dos componentes individuais. Os testes fotocatalíticos sob irradiação UV demonstraram elevada eficiência na degradação do metronidazol, alcançando 83,5% de remoção para a amostra 1:1 e 74,63% e 74,76% para as amostras 1:2 e 1:3, respectivamente, após 150 minutos de exposição. Testes de supressores de espécies reativas indicaram que os buracos ( $h^+$ ) desempenham o papel majoritário na reação fotocatalítica, seguidos pelos elétrons ( $e^-$ ), íons superóxido ( $O_2^-$ ) e radicais hidroxila ( $\bullet OH$ ), na ordem de contribuição:  $h^+ > e^- > O_2^- > \bullet OH$ . Testes de reuso revelaram que o compósito mantém uma eficiência de degradação de 40,3% após múltiplos ciclos.

**Palavras-chave:** CdS, cinzas, remediação ambiental, fotocatalise.

## ABSTRACT

*Composites derived from industrial waste ash have attracted increasing attention due to their wide range of applications, particularly in environmental remediation [1–4]. The structural analysis revealed significant interactions between the composite components. The objective of this study was the synthesis of a composite based on the incorporation of cadmium sulfide (CdS) into rice husk ash (RHA), aiming at the photocatalytic removal of the pharmaceutical compound metronidazole in aqueous medium. The structural properties confirmed notable interactions among the constituents of the composite. Morphological analysis validated the formation of the hybrid material, with a homogeneous distribution of CdS particles on the RHA surface. Optical characterization indicated that the incorporation of CdS into the RHA matrix resulted in materials with bandgap energies of 2.413 eV, 2.434 eV, and 2.434 eV for the CdS:RHA molar ratios of 1:1, 1:2, and 1:3, respectively, and introduced structural defects characteristic of the individual components. Photocatalytic tests under UV irradiation demonstrated high efficiency in metronidazole degradation, achieving removal rates of 83.5% for the 1:1 sample and 74.63% and 74.76% for the 1:2 and 1:3 samples, respectively, after 150 minutes of exposure. Reactive species scavenger tests indicated that photogenerated holes ( $h^+$ ) played the dominant role in the photocatalytic reaction, followed by electrons ( $e^-$ ), superoxide ions ( $O_2^-$ ), and hydroxyl radicals ( $\bullet OH$ ), in the following order of contribution:  $h^+ > e^- > O_2^- > \bullet OH$ . Reusability tests revealed that the composite maintained a degradation efficiency of 40.3% after multiple cycles.*

**Keywords:** CdS, ash, environmental remediation, photocatalysis.

## REFERÊNCIAS

- [1] M. Farzadkia, E. Bazrafshan, A. Esrafil, J.K. Yang, M. Shirzad-Siboni, Photocatalytic degradation of Metronidazole with illuminated TiO<sub>2</sub> nanoparticles, J Environ Health Sci Eng 13 (2015). <https://doi.org/10.1186/s40201-015-0194-y>.
- [2] V. Chander, B. Sharma, V. Negi, R.S. Aswal, P. Singh, R. Singh, R. Dobhal, Pharmaceutical compounds in drinking water, J Xenobiot 6 (2016). <https://doi.org/10.4081/xeno.2016.5774>.
- [3] Z. Shalabayev, M. Baláž, N. Khan, Y. Nurlan, A. Augustyniak, N. Daneu, B. Tatykayev, E. Dutková, G. Burashev, M. Casas-Luna, R. Džunda, R. Bureš, L. Čelko, A. Ilin, M. Burkitbayev, Sustainable Synthesis of Cadmium Sulfide, with Applicability in Photocatalysis, Hydrogen Production, and as an Antibacterial Agent, Using Two Mechanochemical Protocols, Nanomaterials 12 (2022). <https://doi.org/10.3390/nano12081250>.
- [4] J. Payá, J. Monzó, M.V. Borrachero, F. Amahjour, I. Girbés, S. Velázquez, L.M. Ordóñez, Advantages in the use of fly ashes in cements containing pozzolanic combustion residues: silica fume, sewage sludge ash, spent fluidized bed catalyst and rice husk ash, Journal of Chemical Technology & Biotechnology 77 (2002) 331–335. <https://doi.org/10.1002/jctb.583>.



*International Conference for  
Academia and Industry Co-operation*

**09 a 13 de junho de 2025**

Instituto Federal do Maranhão | Campus São Luís - Monte Castelo



5th

**IMMSEM**

*International Meeting in Materials  
Science and Engineering of Maranhão*