



1º Encontro Regional de Engenharia Química na Amazônia (I EREQ-Amazon)

“Os grandes desafios da Engenharia Química na região Amazônica”

ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TEMPERATURA NA CINÉTICA ENZIMÁTICA DE SÍNTESE DE AMOXICILINA

Filipe Vicente de Jesus¹; Lucas Figueiredo Formigosa²; Lidiane da Silva Soares³; Marcos Vinícius da Silva Paula⁴; Luciana Rocha Barros Gonçalves⁵, Bruno Marques Viegas^{3,*}

¹ Faculdade de Engenharia Química, Instituto de Tecnologia, Universidade Federal do Pará, Belém, Pará, Brasil.

² Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Instituto de Tecnologia, Universidade Federal do Pará, Belém, Pará, Brasil.

³ Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia, Instituto de Ciências Biológicas, Universidade Federal do Pará, Belém, Pará, Brasil.

⁴ Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais, Campus de Ananindeua, Universidade Federal do Pará, Ananindeua, Pará, Brasil.

⁵ Departamento de Engenharia Química, Centro de Tecnologia, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, Ceará, Brasil.

* E-mail do autor para correspondência: viegasmbruno@gmail.com

Eixo Temático: Simulação, Otimização e Controle de Processos

Resumo: A síntese enzimática de antibióticos β -lactâmicos, como a amoxicilina, surge como uma alternativa sustentável às rotas químicas convencionais, devido à maior seletividade e menor geração de resíduos. Este trabalho teve como objetivo investigar a influência da temperatura na cinética enzimática da síntese de amoxicilina, por meio da modelagem matemática, estimativa de parâmetros e simulação computacional do processo. Foram utilizados dados experimentais da literatura para duas condições de temperatura (4 °C e 25 °C), considerando a penicilina G acilase (PGA) imobilizada como biocatalisador da reação. O modelo semiempírico baseou-se na cinética de Michaelis-Menten modificada, incluindo os efeitos inibitórios de produtos e substratos, além da equação de Arrhenius para descrever a dependência térmica das constantes catalíticas. Os parâmetros foram estimados pelo método de Monte Carlo via Cadeia de Markov (MCMC), implementado com o algoritmo de Metropolis-Hastings, e a qualidade do ajuste foi avaliada pela raiz do erro quadrático médio relativo (rRMSE). Os resultados obtidos demonstraram que as constantes catalíticas apresentaram comportamento distinto entre as temperaturas, sendo k_2 superior a k_1 em ambos os casos, refletindo maior velocidade intrínseca da hidrólise. As energias de ativação estimadas evidenciaram comportamentos termodinâmicos diferenciados, com E_{a1} negativa e E_{a2} positiva, interpretadas como consequência de mecanismos reacionais distintos. A validação do modelo indicou excelente ajuste a 4 °C (erro médio de 13,59%) e bom ajuste a 25 °C (16,84%), confirmando a robustez da abordagem bayesiana para análise de sistemas enzimáticos complexos. Conclui-se que a estimativa proposta é adequada para descrever a síntese enzimática de amoxicilina em diferentes temperaturas de reação e pode ser aplicada a outros sistemas de interesse farmacêutico.

Palavras-chave: Cinética Enzimática; Bayesiana; Amoxicilina; Equação de Arrhenius; MCMC.