

# Chemical Reaction Engineering: Difusão Com Biotransformação

D. R. M. Vieira<sup>1</sup>, S. A. Cardoso<sup>1</sup>, A. S. Santos<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal do Pará, Pará, Brasil

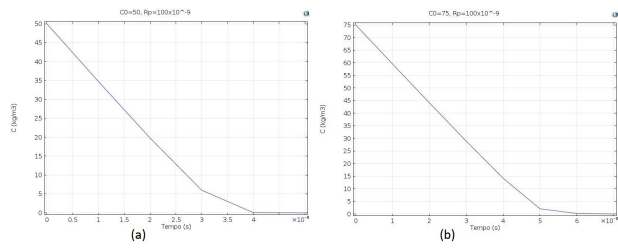
## Abstract

A biotransformação de substratos utilizando enzimas imobilizadas em nanopartículas presentes num meio fluido (substrato), contido num biorreator CSTR foi investigada. O substrato presente no meio fluido é biotransformado em produto, pelas enzimas imobilizadas nas nanopartículas. Nesse trabalho, a difusão na superfície da nanopartícula, onde ocorre a biotransformação, foi investigada através do uso do software COMSOL Multiphysics®. A relação utilizada para o coeficiente de difusão do substrato para a nanopartícula seguiu a equação de Stokes-Einstein, apresentada no estudo de Kleinstreuer et al (2008). A equação cinética de biotransformação do substrato pela enzima seguiu o modelo de Michaelis-Menten. O módulo Chemical Reaction Engineering e a interface física General Form PDE, do software COMSOL Multiphysics® foram empregados para representar as equações do modelo de difusão e para a obtenção dos resultados simulados. Foram simulados eventos em nanopartículas de diferentes tamanhos, e em diferentes concentrações iniciais de substrato presente no meio fluido. Os resultados obtidos inicialmente mostraram-se bons. A Figura 1 a-b apresenta o perfil de consumo de substrato na superfície de uma nano partícula com superfície imobilizada por uma camada de enzima. Esse resultado evidencia que na solução de substrato com maior concentração, o tempo de consumo é mais longo e que, em ambos os casos, o consumo é muito rápido devido ao tamanho do sistema, nanopartícula - camada de enzima, ser de escala nanométrica.

## Reference

Kleinstreuer et al (2008). Microfluidics of nano-drug delivery, International Journal of Heat and Mass Transfer, 51, 5590-5597 pp.

## Figures used in the abstract



**Figure 1:** Perfil de concentração de substrato ao longo da superfície da nano partícula ao decorrer do tempo num sistema (nano partícula mais camada de enzima) de raio  $R_p = 100 \times 10^{-9}$  m.