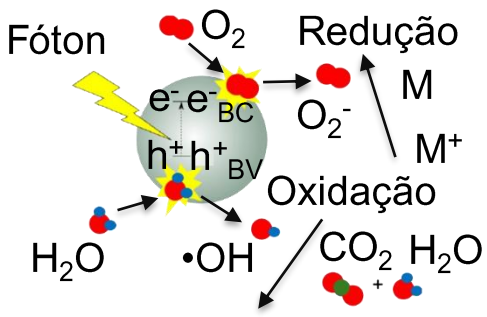
cbecimat26
26° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais
22 a 26 de novembro de 2026
Costão do Santinho
Florianópolis-SC

Uso de inteligência artificial e análise de clusters para a previsibilidade dos parâmetros influenciáveis na fotodegradação de contaminantes emergentes

Daniel Moro Druzian[1]; Eduarda Castilho da Silveira1; Vinícius Rodrigues Oviedo[1]; Marcos Vinicius Pasqualoto Prior[1]; William Leonardo da Silva[1]
[1]Grupo de Pesquisa em Nanomateriais Aplicados (GPNAp)
Universidade Franciscana (UFN), Santa Maria-RS, Brasil

Introdução

Fotocatálise heterogênea

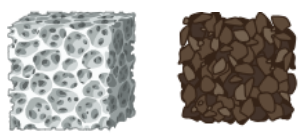


Inteligência artificial

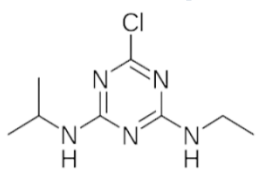


Correlação
Clusterização

Nanomateriais



Poluentes orgânicos



Objetivos

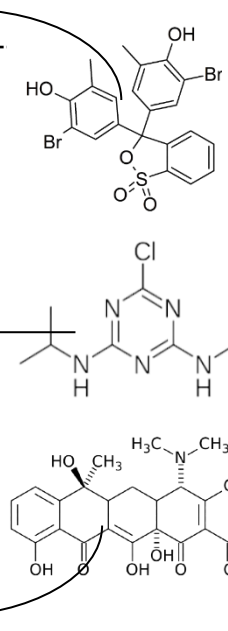
Avaliar e investigar o efeito das **propriedades físico-químicas** na fotodegradação de **contaminantes emergentes**.

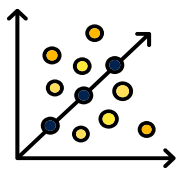
Metodologia

Propriedades/ Inteligência Artificial

Tabela 1. Propriedades analisadas.

Propriedades
Aplicação (Têxtil, Alimentícia e Biológica)
Poluente (Azoico e Não-Azoico)
Carga (positiva e negativa)
pKa
Absorbância máxima
PZ em diferentes temperaturas
Comprimento de onda máximo
Massa molecular (MM)
pH da solução



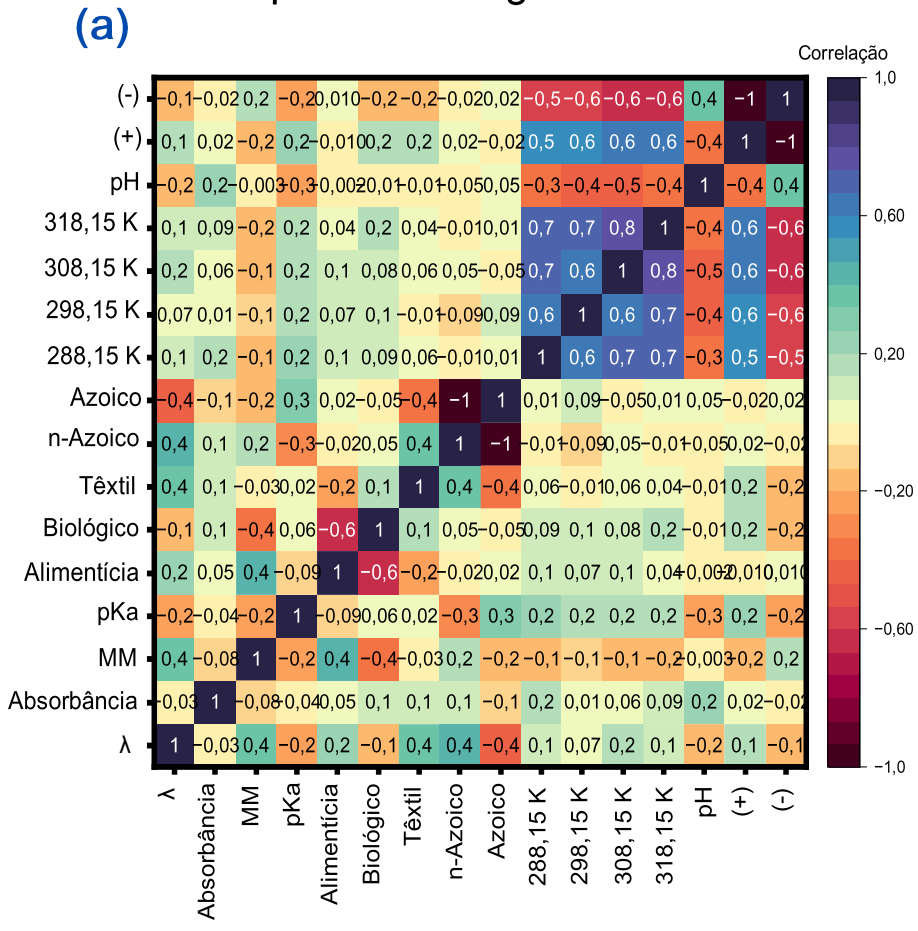


Correlação
Clusterização

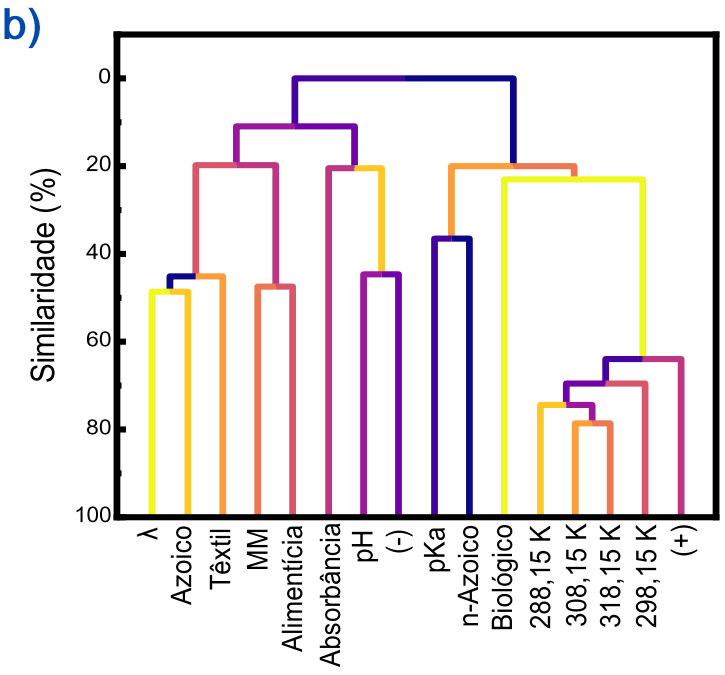
Resultados e Discussão

Figura 1. (a) Correlação de Pearson; (b) Clusterização hierárquica das propriedades dos poluentes orgânicos.

(a)



(b)



(Bayahia, 2024; Bouchal *et al.*, 2025; Nunes *et al.*, 2025)

Conclusões

- Propriedades **moleculares** e **estruturais**;
- Química (**Azoico versus Não-Azoico**) e a dinâmica da temperatura no Potencial zeta;
- Potenciais **riscos toxicológicos**.

Referências

- BAYAHIA, H. Schinus molle extract mediated green synthesis of iron niobate photocatalyst for the degradation of methyl orange dye under visible light. **Journal of Saudi Chemical Society**, v. 28, p. 101876–101887, 2024.
- BOUCHAL, W. *et al.* Self-combustion CeO_2 nanoparticles as multifunctional Catalyst: Photodegradation of hazardous pollutants (Nitrobenzene & methyl red) and antioxidant activity. **Ceramics International**, v. 51, p. 58630–58646, 2025.
- NUNES, A. L. M. *et al.* Machine learning-guided photocatalytic degradation of Eriochrome Black T using green Nb_2O_5-NPs@CeO_2-NPs. **Inorganic Chemistry Communications**, v. 179, p. 114779–114790, 2025.

Agradecimentos

UFN.TEC
GPNAp
Programa de Pós-Graduação em Nanociências
FAPERGS
UFN Universidade Franciscana
70 ANOS