

LÂNA MARIA DE SOUSA

**ESTUDO CINÉTICO PARA A CONVERSÃO DE ETANOL EM ACETALDEÍDO
DURANTE O PROCESSO DE ELIMINAÇÃO DE ETANOL NO ORGANISMO
HUMANO**

Monografia apresentada ao Departamento de
Química da Universidade Federal de Viçosa,
como parte das exigências para a conclusão do
Curso de Bacharelado em Química.

Orientador: Emílio Borges

**VIÇOSA – MINAS GERAIS
2021**

AGRADECIMENTOS

A Deus que sem Ele eu não estaria viva e nem vivenciaria todo a trajetória para este trabalho.

À Nossa Senhora que sempre me protegeu e me mostrou o melhor caminho a se fazer.

Ao meu anjo da guarda e a todos os santos, em especial à Santa Rita de Cássia.

Aos meus queridos e amados pais, Maria do Carmo e Luis, que sempre me apoiaram e me auxiliaram em minha formação e que sem eles não teria vivido esta oportunidade. Eles são a minha inspiração e a minha força de vontade de melhorar cada dia mais.

Aos meus queridos irmãos, Lara, Lucas e Luma que tanto amo e que sempre estiveram comigo nos bons e maus momentos, me aconselhando e auxiliando.

Ao meu querido orientador e professor Emílio Borges, que não só me apoiou e me auxiliou neste trabalho, como em diversas outras disciplinas e discussões externas. O senhor é um professor que me espelha e que sou imensamente grata de ter a oportunidade de conhecê-lo e tê-lo como meu orientador.

À Universidade Federal de Viçosa e ao Departamento de Química por possibilitar o desenvolvimento deste estudo.

RESUMO

DE SOUSA, L. M. Monografia de Conclusão do Curso de Bacharelado em Química. Universidade Federal de Viçosa, novembro de 2021. **Estudo cinético para a conversão de etanol em acetaldeído durante o processo de eliminação de etanol no organismo humano.** Orientador: Prof. Emílio Borges.

O presente trabalho tem como objetivo principal discutir a cinética de eliminação do etanol em fisiologia humana conforme o mecanismo de Michaelis-Menten. Este estudo abordou através de um problema inverso mal colocado a conversão do etanol em acetaldeído via atuação da enzima álcool desidrogenase (ADH). A análise teve como ferramenta a utilização de concentrações experimentais da literatura para obter a função erro de um algoritmo computacional baseado em redes neurais artificiais de Hopfield, um método muito bem fundamentado para a resolução de problemas inversos em cinética química. Assim, foram obtidas as constantes de velocidade para cada etapa do mecanismo, sendo possível não só reproduzir os dados da literatura de forma mais completa como também obter a etapa cineticamente dominante, as energias de Gibbs de ativação para cada etapa do mecanismo, a constante de velocidade de Michaelis-Menten, a eficiência e a constante catalítica do processo cinético. Desta maneira, a pesquisa permitiu uma análise ainda não realizada de acordo com a literatura.

Palavras-chave: *Etanol; cinética de eliminação; Michaelis-Menten; problema inverso; rede neural artificial; acetaldeído; ADH.*

ABSTRACT

DE SOUSA, LM Completion Monograph of the Bachelor's Degree in Chemistry. Federal University of Viçosa, November 2021. **Kinetic study for the conversion of ethanol into acetaldehyde during the process of eliminating ethanol in the human body.** Advisor: Prof. Emilio Borges.

The main objective of the present work is to discuss the kinetics of ethanol elimination in human physiology according to the Michaelis-Menten mechanism. This study addressed, through a misplaced inverse problem, the conversion of ethanol into acetaldehyde via the action of the enzyme alcohol dehydrogenase (ADH). The analysis had as a tool the use of experimental concentrations from the literature to obtain the error function of a computational algorithm based on Hopfield artificial neural networks, a very well-founded method for solving inverse problems in chemical kinetics. Thus, the velocity constants for each step of the mechanism were obtained, making it possible not only to reproduce the literature data more completely, but also to obtain the kinetically dominant step, the Gibbs activation energies for each step of the mechanism, the constant of Michaelis-Menten speed, efficiency and catalytic constant of the kinetic process. In this way, the research allowed an analysis not yet carried out according to the literature.

Keywords: *Ethanol; elimination kinetics; Michaelis-Menten; inverse problem; artificial neural network; acetaldehyde; ADH.*