



UNIVERSIDADE FEDERAL DO TOCANTINS
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE GURUPI
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

MURIELLY FERNANDA RIBEIRO BIHAIN

**ESTUDO TEÓRICO DA INTERAÇÃO DO ÍON ÓXIDO DE URÂNIO (UO_2^{2+}) EM
MATRIZES DE BIOPOLÍMEROS**

Gurupi, TO

2026

Murielly Fernanda Ribeiro Bihain

Estudo teórico da interação do íon óxido de urânio (UO_2^{2+}) em matrizes de biopolímeros

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Química da Universidade Federal do Tocantins (UFT), Campus Universitário de Gurupi para obtenção do título de Mestra em Química.

Orientador: Prof. Dr. Douglas Henrique Pereira

Gurupi, TO

2026

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Tocantins

- B594e Bihain, Murielly Fernanda Ribeiro.
Estudo teórico da interação do íon óxido de urânio (UO₂²⁺) em matrizes de biopolímeros. / Murielly Fernanda Ribeiro Bihain. – Gurupi, TO, 2026.
66 f.
- Dissertação (Mestrado Acadêmico) - Universidade Federal do Tocantins – Câmpus Universitário de Gurupi - Curso de Pós-Graduação (Mestrado) em Química, 2026.
- Orientador: Douglas Henrique Pereira
1. Adsorção do Urânio. 2. Materiais lignocelulósicos. 3. Simulação Computacional. 4. Tratamento de águas residuárias. I. Título

CDD 540

TODOS OS DIREITOS RESERVADOS – A reprodução total ou parcial, de qualquer forma ou por qualquer meio deste documento é autorizado desde que citada a fonte. A violação dos direitos do autor (Lei nº 9.610/98) é crime estabelecido pelo artigo 184 do Código Penal.

Elaborado pelo sistema de geração automática de ficha catalográfica da UFT com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

MURIELLY FERNANDA RIBEIRO BIHAIN

ESTUDO TEÓRICO DA INTERAÇÃO DO ÍON ÓXIDO DE URÂNIO (UO_2^{2+}) EM
MATRIZES DE BIOPOLÍMEROS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Química da Universidade Federal do Tocantins – Campus Universitário avaliada para a obtenção do título de Mestre em Química e aprovada em sua forma final pelo Orientador e pela Banca Examinadora.

Data de aprovação: 30 de janeiro de 2026.

Banca Examinadora

Prof. Dr. Douglas Henrique Pereira, ITA

Profa. Dra. Grasielle Soares Cavallini, UFT

Prof. Dr. Leonardo Tsuyoshi Ueno, ITA

Dedico a Helena Varanda, a criança que mais amo. Dedico a Lucimagna, a minha rocha; ao Henrique, a pessoa que eu escolho todos os dias; a mim, pois eu não tive medo. Dedico as Sete Linhas, Saravá a Umbanda.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente aos meus Guias e a Deus, por me conceder forças a concluir essa jornada e me ajudar a me encontrar nas noites mais sombrias. A Umbanda por ter sido meu lar e meu afago quando nenhum outro lugar e nenhuma outra pessoa era. Saravá a Umbanda e as Setes Linhas!

Agradeço profundamente aos meus pais: Ma. Professora Lucimagna Ribeiro da Costa e Professor Sidinei Bihain. Em especial a minha mãe pelo apoio emocional, financeiro, pelo incentivo, pelo colo quando as coisas foram difíceis, que com seu amor me ajudou a trilhar com força essa caminhada.

Aos meu orientador Professor Dr. Douglas Henrique Pereira por todos esses anos de pesquisa, da iniciação da minha pessoa como uma pesquisadora, pelos conselhos, pela paciência e compreensão ao longo dessa jornada.

Aos meus colegas do Laboratório de Matemática Aplicada e Química Computacional (LABMAQC-UFT) por todos esses anos de parceria e companheirismo ao longo das pesquisas e do Grupo Estudos Teóricos de Espectroscopia e Reatividade (Grupo ETER-ITA) por me acolherem durante o ano de 2025.

Ao meu companheiro de todas as horas, Henrique Alexandre Taveira de Ávila, por ser meu suporte, por estar comigo nas horas mais difíceis e madrugada adentro dividindo o fardo. Obrigada por deixar minha vida mais alegre e mais leve. Agradeço por seu amor e por seu companheirismo.

Aos meus amigos: Adryha Maria Fortes, Mathews Moreira, Letícia Carolaine, Paulo Ricardo, Renata Lino, Letícia Vetrano, Samanda Varanda que tornaram os dias mais leves com as risadas, os cafezinhos e cada momento compartilhado.

A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES - 001) pela bolsa de fomento; a Universidade Federal do Tocantins (UFT), ao Programa de Pós-Graduação em Química -UFT (PPGQ-UFT); ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq, Grant # 304002/2024-0; #443317/2024); a Fundação de Amparo à Pesquisa de São Paulo (FAPESP Grant #2023/17727-2) e ao Grupo ETER, estes que possibilitaram a realização desta pesquisa.

Agradeço a mim, por não ter desistido e por me dedicar tanto ao que faço; por ter suportado todo o trajeto e as dificuldades encontradas, por conseguir enfim realizar o meu sonho.

RESUMO

O urânio (U) é a principal matéria-prima para a energia nuclear, que tem sido uma alternativa às fontes de energia renováveis. Na natureza sua forma mais estável que é altamente solúvel é o urânio hexavalente U(VI). Sua presença em repositórios profundos criados para descarte de rejeitos radioativos ou reprocessamento e processamento nuclear, faz com que esta espécie esteja presente em soluções aquosas, podendo causar danos ambientais e a saúde humana, o que torna necessária sua remoção. Com isso, adsorção é considerada uma técnica eficiente para remoção de urânio de recursos hídricos, principalmente devido à facilidade prevista de adsorção em bioadsorventes como compostos de celulose, hemicelulose e lignina. Assim, o objetivo deste trabalho é estudar os mecanismos de remoção por adsorção de dióxido de urânio (UO_2^{2+}) do meio aquoso usando matrizes de celulose (CE) hemicelulose (Hm1 e Hm2) e lignina (GS) por meio de simulações computacionais. Os sistemas adsorvato-adsorvente foram otimizados e observou-se que entre as matrizes, o UO_2^{2+} apresentou a maior energia de interação com a matriz de CE devido aos seus grupos hidroxila, seguido pela Hm1, Hm2 e pôr fim a GS que apresentou interações mais fracas. Todas as interações avaliadas foram exotérmicas ($\Delta H < 0$) e quase todas foram espontâneas ($\Delta_r G < 0$), com exceção Hm1- $\text{UO}_2^{2+(1)}$ e GS- $\text{UO}_2^{2+(1)}$. Para os parâmetros topológicos, obtidos pela Teoria Quântica de Átomos em Moléculas (QTAIM), todos os tipos de interações foram caracterizados como não covalentes em que as interações do urânio com os átomos de oxigênio das matrizes foram parcialmente covalentes e aquelas dos átomos de oxigênio do UO_2^{2+} com os átomos de hidrogênio das matrizes eletrostáticas. Essas tendências também foram visualizadas nas análises de Interações Não Covalentes (NCI), por meio dos gráficos de isosuperfícies, pois, em resumo, as interações U- $\text{O}_{\text{adsorvente}}$ apresentaram coloração azulada indicando interação forte e as interações $\text{O}_{\text{adsorvato}}$ - $\text{H}_{\text{adsorvente}}$ apresentaram coloração esverdeada indicando forças de van der Waals. Assim, concluiu-se que a celulose, hemicelulose e lignina não modificadas são boas matrizes adsorventes para remover UO_2^{2+} dos recursos hídricos. Os estudos teóricos sobre os mecanismos de adsorção de matrizes de celulose, lignina e hemicelulose apresentados neste trabalho, como a simulação de estruturas eletrônicas, podem fornecer insights sobre os mecanismos de interação e aprimorar nossa compreensão das interações entre UO_2^{2+} ... biopolímeros durante processos de remediação ambiental.

Palavras-chave: Urânio; Celulose; Adsorção; Hemicelulose; Lignina; QTAIM.

ABSTRACT

Uranium (U) is the main raw material for nuclear energy, which has been an alternative to renewable energy sources. In nature, its most stable form, which is highly soluble, is hexavalent uranium U(VI). Its presence in deep repositories created for the disposal of radioactive waste or nuclear reprocessing and processing means that this species is present in aqueous solutions, which can cause damage to the environment and human health, making its removal necessary. As a result, adsorption is considered an efficient technique for removing uranium from water resources, mainly due to the expected ease of adsorption in bioadsorbents such as cellulose, hemicellulose, and lignin compounds. Thus, the objective of this work is to study the mechanisms of removal by adsorption of uranium dioxide (UO_2^{2+}) from the aqueous medium using cellulose (CE), hemicellulose (Hm1 and Hm2), and lignin (GS) matrices through computational simulations. The adsorbate-adsorbent systems were optimized, and it was observed that among the matrices, UO_2^{2+} presented the highest interaction energy with the CE matrix due to its hydroxyl groups, followed by Hm1, Hm2, and finally GS, which presented weaker interactions. All interactions evaluated were exothermic ($\Delta H < 0$) and almost all were spontaneous ($\Delta_r G < 0$), with the exception of Hm1- $\text{UO}_2^{2+(1)}$ and GS- $\text{UO}_2^{2+(1)}$. For the topological parameters obtained by Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM), all types of interactions were characterized as non-covalent, in which the interactions of uranium with the oxygen atoms of the matrices were partially covalent, and those of the oxygen atoms of UO_2^{2+} with the hydrogen atoms of the electrostatic matrices. These trends were also visualized in the Non-Covalent Interactions (NCI) analyses, through isosurface graphs, since, in summary, the U- $\text{O}_{\text{adsorbent}}$ interactions presented a bluish color indicating strong interaction, and the $\text{O}_{\text{adsorbate}}$ - $\text{H}_{\text{adsorbent}}$ interactions presented a greenish color indicating van der Waals forces. Thus, it was concluded that unmodified cellulose, hemicellulose and lignin are good adsorbent matrices for removing UO_2^{2+} from water resources. The theoretical studies on the adsorption mechanisms of cellulose, lignin, and hemicellulose matrices shown in this work, such as the simulation of electronic structures, can provide insights into the interaction mechanisms and enhance our understanding of UO_2^{2+} ·biopolymer interactions during environmental remediation processes.

Keywords: Uranium; Cellulose; Adsorption; Hemicellulose; Lignin; QTAIM.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1. Estruturas estudadas de a) celulose, b) Hm1, c) Hm2 e d) lignina.	17
Figura 2. Fissão nuclear do urânio.	23
Figura 3. Ciclo de Decaimento do U-235.....	26
Figura 4. Mapas de Potencial Eletrostático das matrizes de celulose (CE), hemicelulose (Hm1 e Hm2), lignina (GS) e íon uranila (UO_2^{2+}).....	40
Figura 5. Comprimento de ligação do UO_2^{2+} em relação as matrizes de celulose.....	41
Figura 6. Comprimento de ligação do UO_2^{2+} em relação as matrizes de hemicelulose (Hm1 e Hm2).....	42
Figura 7. Comprimento de ligação do UO_2^{2+} em relação as matrizes de Lignina (GS).....	45
Figura 8. Gráficos de isosuperfícies (a esquerda) e RDG (a direita) para interação do UO_2^{2+} com as matrizes de celulose (CE), hemicelulose (Hm1 e Hm2) e lignina (SG).	51

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Energia de interação (ΔE_{Bind}), Entalpia ($\Delta_r H$) e Energia de Gibbs ($\Delta_r G$) a 298K para os complexos estudados.	47
Tabela 2. Parâmetros topológicos calculados em unidades atômicas (a.u) nos BCPs das interações para matriz de celulose.	48
Tabela 3. Parâmetros topológicos calculados em unidades atômicas (a.u) nos BCPs das interações para matriz de hemicelulose (Hm1 e Hm2).....	49
Tabela 4. Parâmetros topológicos calculados em unidades atômicas (a.u) nos BCPs das interações para matriz de lignina.	50

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CE	Celulose
Hm1	Hemicelulose ramificada com arabinose
Hm2	Hemicelulose não ramificada
GS	Lignina composta dos fragmentos coniferil e sinapil
DFT	Teoria do Funcional da Densidade (<i>Density Functional Theory</i>)
G	Álcool coniferílico
S	Álcool sinapílico
U(VI)	Urânio hexavalente
UO ₂ ²⁺	Íon óxido de urânio; íon uranila
QTAIM	Teoria Quântica de Átomos em Moléculas (<i>Quantum Theory Atoms in Molecules</i>)
NCI	Interação Não-Covalente (<i>Non-Covalent interaction</i>)
RDG	Gradiente de Densidade Reduzida (<i>Reduced Density Gradient</i>)
ΔH	Varição de Entalpia
ΔrG	Energia reacional de Gibbs
G(r)	Densidade da energia cinética eletrônica
V(r)	Densidade da energia potencial eletrônica
$\rho(r)$	Densidade eletrônica
$\nabla^2\rho(r)$	Laplaciana da densidade eletrônica
H(r)	Densidade da energia total eletrônica
ΔE_{bind}	Energia de interação
E_{HB}	Energia de ligação de hidrogênio

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	OBJETIVOS	16
2.1	Objetivo Geral	16
2.2	Objetivos Específicos	16
3	METODOLOGIA	17
4	REFERÊNCIAL TEÓRICO	22
4.1	Mudanças Climáticas e a Necessidade de Energias Renováveis	22
4.2	ENERGIA NUCLEAR	23
4.2.1	Energia Nuclear no Brasil	25
4.3	Urânio	25
4.3.1	Ciclo do Combustível Nuclear	27
4.3.2	Problemáticas Ambientais do Urânio	29
4.4	Íon Uranila (UO_2^{2+})	30
4.5	Adsorção	32
4.5.1	Material Lignocelulósico	34
4.5.1.1	<i>Celulose</i>	34
4.5.1.2	<i>Hemicelulose</i>	36
4.5.1.3	<i>Lignina</i>	37
4.5.1.4	<i>Material lignocelulósico para adsorção de U(VI): teórico e experimental</i>	38
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	40
5.1	Mapa de Potencial Eletrostático	40
5.2	Parâmetros Estruturais: Distâncias de Interação	41
5.3	Energias de Interação, Variação de Entalpia e Variação da Energia de Gibbs	46
5.4	Teoria Quântica de Átomos em Moléculas	47
5.5	Interação Não-Covalente (NCI)	50
6	CONCLUSÃO	56
	REFERÊNCIAS	57

1 INTRODUÇÃO

A rápida industrialização e o crescimento populacional fez com que a demanda por energia global aumentasse, e conseqüentemente, provocasse o aumento na poluição ambiental devido à alta demanda de energias derivadas de combustíveis fósseis, tornando inevitável a procura por alternativas de produção de energia sustentável (Hefner; Marland; Oda, 2024; Michaelides; Michaelides, 2020; Murphy, 2024). Dentre as alternativas, a energia nuclear é uma forte candidata (Michaelides; Michaelides, 2020) e seu uso vem se intensificando progressivamente (Jun et al., 2025). No entanto, os processos de mineração e beneficiamento de urânio (U), a principal matéria-prima do combustível nuclear, tem causado danos ao meio ambiente devido ao aumento da concentração do U (Rana et al., 2016).

O urânio ocorre naturalmente em forma de minério, então sua presença natural pode ocorrer no ar, água e solo (Abolli et al., 2024). Porém, atividades antropogênicas como mineração de rochas fosfatadas, minério de urânio, utilização de fertilizantes fosfatados, efluentes de usinas nucleares e industriais de processamento de U, extração de tório, dentre outros podem contribuir para a contaminação de águas subterrâneas, solos e outros meio por U (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022; Gavrilescu; Pavel; Cretescu, 2009; Wufuer et al., 2025).

O urânio existe em diferentes estados de oxidação, porém em ambientes aquáticos, os estados predominantes são o estado de oxidação tetravalente (U(IV)) e hexavalente (U(VI)). (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022), sendo o U(VI) solúvel em água (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022; Prusty et al., 2022). A forma mais comum do U(VI) em meio aquoso de pH neutro é o íon uranila (UO_2^{2+}) (Mathivanan et al., 2022). Os efeitos adversos a saúde causados pelo excesso de U na água potável estão relacionados a sua quimiotoxicidade, emissão de radiação e longo tempo de meia-vida no ambiente (Fernández-Arias; Vergara; Antón-Sancho, 2023). Uma pessoa quando exposta ao U pode ter órgãos como rins, pulmão, fígado, bexiga comprometidos, além do desenvolvimento de câncer e a radioatividade do mesmo pode afetar os ossos pela emissão de partículas α (Faqir et al., 2025; Jha et al., 2024). Por isso, imobilizar e remover o U do meio ambiente é de suma importância.

A remoção do UO_2^{2+} pode ser dada por adsorção, osmose reversa (Shen; Schäfer, 2014), coagulação e precipitação (Li et al., 2017), fotocatalise (Salomone et al., 2015), tratamento biológicos (Stylo et al., 2013), dentre outros (Prusty et al., 2022; Xie et al., 2019). Dentre essas técnicas, a adsorção se destaca para a remoção do UO_2^{2+} devido sua eficiência, baixo custo, ampla adaptabilidade, pouco resíduo secundário gerado e facilidade de implementação e

rentabilidade. Materiais como óxidos metálicos, argilas (Broda et al., 2022), sílica mesoporosas (Sen et al., 2021), óxido de grafeno (Liu et al., 2025), estruturas metal-orgânicas (MOFs) (Şimşek et al., 2022), biopolímeros (Levy-Ontman et al., 2023), dentre outros (Xie et al., 2019) são utilizados em pesquisas para tratamento de águas residuárias contendo urânio.

Os biopolímeros como materiais a base de polissacarídeos são amplamente utilizados em técnicas de adsorção por serem renováveis, biodegradáveis e seguros para o uso (Levy-Ontman et al., 2023). As variabilidades decorrente de cada polissacarídeos e dos seus grupos funcionais e estruturas, torna-os aplicáveis, sendo mais econômicos que os adsorventes sintéticos (Levy-Ontman et al., 2023; Prusty et al., 2022; Xie et al., 2019). Dentre esses biopolímeros destacam-se os materiais lignocelulósicos dos quais contém a celulose, hemicelulose e lignina.

A celulose é a matéria prima biopolimérica mais abundante na natureza, constituindo o principal componente das fibras vegetais (Darmenbayeva et al., 2024; Etale et al., 2023; Hokkanen; Bhatnagar; Sillanpää, 2016; Meng et al., 2024). Ela pode ser derivada de uma variedade de fontes como algodão, madeira, algas, bambu, dentre outros, assim como a hemicelulose e lignina (Etale et al., 2023; Hokkanen; Bhatnagar; Sillanpää, 2016). A celulose é um polissacarídeo linear com longas cadeias que consistem em unidades de β -D-glucopiranosose unidas por ligações glicosídicas β -1,4 (Etale et al., 2023), que conferem a essa estrutura alta resistência mecânica. Essa molécula possui abundância em grupos hidroxila (-OH) e carboxila, o que facilita os processos de modificação química e física da mesma, além de serem sítios ativos propícios a interação com o UO_2^{2+} , tornando-a uma matéria prima rentável para a remoção deste contaminante (Manyatshe; Sibali, 2025; Prusty et al., 2022; Sharma et al., 2024).

A hemicelulose é um heteropolissacarídeo, pois é composta por diferentes monossacarídeos como a D-xilose e L-arabinose que são pentoses e D-glicose ou D-glucose, D-galactose, D-manose que são hexoses e ainda possuem ácido D-glucorônico e ácido D-galacturônico (He; Liu; Zhang, 2024; Manyatshe; Sibali, 2025; Scheller; Ulvskov, 2010; Şimşek; Kaya; Jalbani, 2023; Xiang et al., 2022; Xiao et al., 2023). Com base nas fontes vegetais, composições e estruturas, as hemiceluloses apresentam uma variedade de tipos, incluindo principalmente glucomananas, xilanas, glucuronoxilanas, dentre outros, das quais podem conter cadeias laterais contendo grupos acetila, arabinose, galactose e ácido metilglucurônico (Gomes et al., 2024; He; Liu; Zhang, 2024; Manyatshe; Sibali, 2025), porém a estrutura detalhada das hemiceluloses e sua abundância variam amplamente entre diferentes espécies e tipos celulares (He; Liu; Zhang, 2024; Manyatshe; Sibali, 2025; Scheller; Ulvskov,

2010; Şimşek; Kaya; Jalbani, 2023; Xiang et al., 2022; Xiao et al., 2023). Devido a sua estrutura ramificada, as xilanas podem ser quimicamente modificadas para favorecer o seu uso como bioadsorventes (Rao et al., 2023). Sua abundância em grupos hidroxilas, assim como a celulose, a torna uma matéria prima viável a remoção do UO_2^{2+} .

A lignina é uma molécula polifenólica complexa e com estrutura amorfa que é formada através da polimerização desidrogenativa realizada por enzimas dos três tipos primários de álcoois: álcool p-cumarílico (H), álcool coniferílico (G) e álcool sinapílico (S) que servem como blocos de construção para a estrutura da lignina por meio de reações químicas (AlQasas; Johnson, 2025; Manyatshe; Sibali, 2025; Santos et al., 2022). A presença dos grupos hidroxila nas macromoléculas de lignina, desempenham um importante papel nas propriedades físicas e químicas além de favorecer seu uso em mecanismos adsorptivos ajudando na sua reatividade devido aos sítios ativos, hidrofiliçidade e biocompatibilidade, tornando-a uma matéria prima segura (Manyatshe; Sibali, 2025) e com potencial de remoção de metais tóxicos (Ge; Li, 2018) como o urânio.

A utilização desses biopolímeros como materiais adsorventes, seja em forma isolada ou em materiais lignocelulósicos, vem sendo investigada como formas eficazes de remoção do UO_2^{2+} (Abutaleb et al., 2020; Elsayed et al., 2023; Levy-Ontman et al., 2023; Şimşek; Kaya; Jalbani, 2023; Zhang et al., 2024). Estudos teóricos referentes aos mecanismos de adsorção com as matrizes de celulose, lignina e hemicelulose, podem ajudar a compreender melhor os mecanismos de interação, uma vez que a química teórica com simulações de estruturas eletrônicas pode servir como ferramenta de compreensão de mecanismos utilizados em remediação ambiental (Bihain; Pereira; Pereira, 2025; Morgon; Coutinho, 2007).

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

Simular por meio de cálculos teóricos a adsorção do UO_2^{2+} em matrizes de celulose, hemicelulose e lignina.

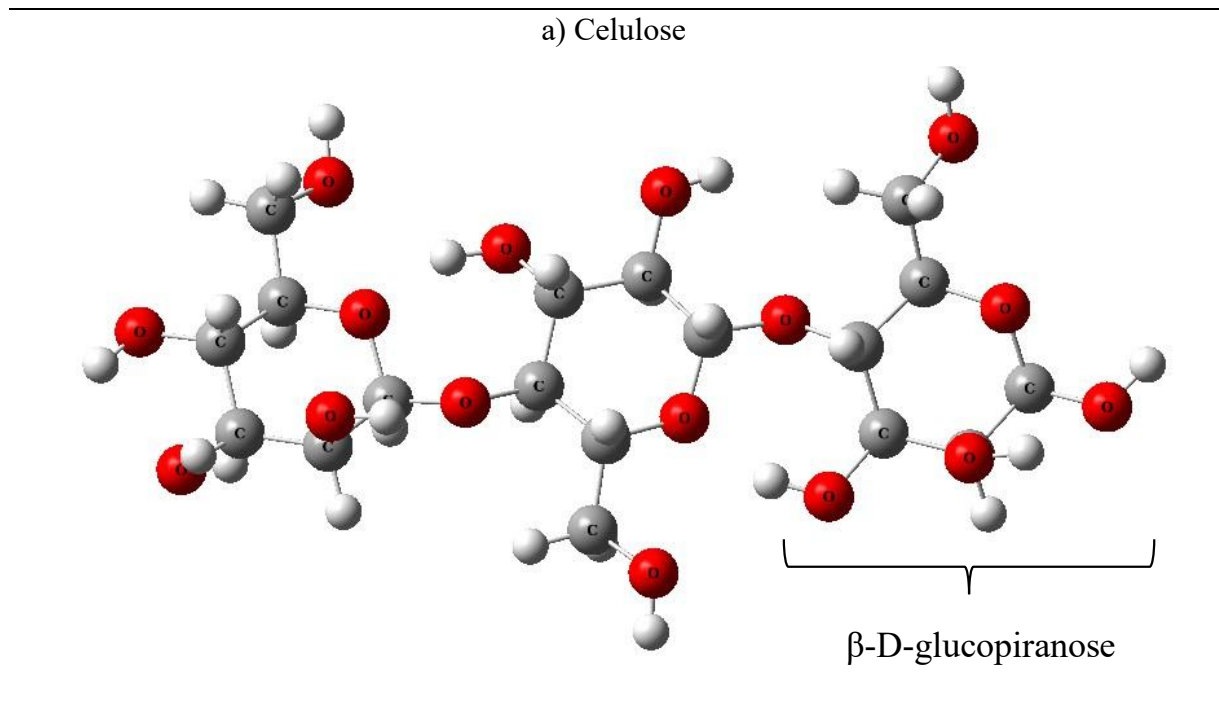
2.2 Objetivos Específicos

- i. Investigar as interações envolvidas na adsorção do UO_2^{2+} nas matrizes de celulose, hemicelulose e lignina;
- ii. Estudar os parâmetros estruturais das interações envolvidas no processo de adsorção;
- iii. Calcular energias de adsorção do sistema para compreender a estabilidade e espontaneidade de interação;
- iv. Utilizar a Teoria Quântica de Átomos em Moléculas (*Quantum Theory of Atoms in Molecules*, QTAIM) para caracterizar, a partir das propriedades topológicas, as ligações envolvidas no processo de interação do UO_2^{2+} com as matrizes;
- v. Analisar os gráficos de isosuperfície gerado pela análise de Interação Não-Covalente (*Non-Covalent Interaction*, NCI) no intuito de observar os resultados de forma visual obtidos pelo QTAIM.

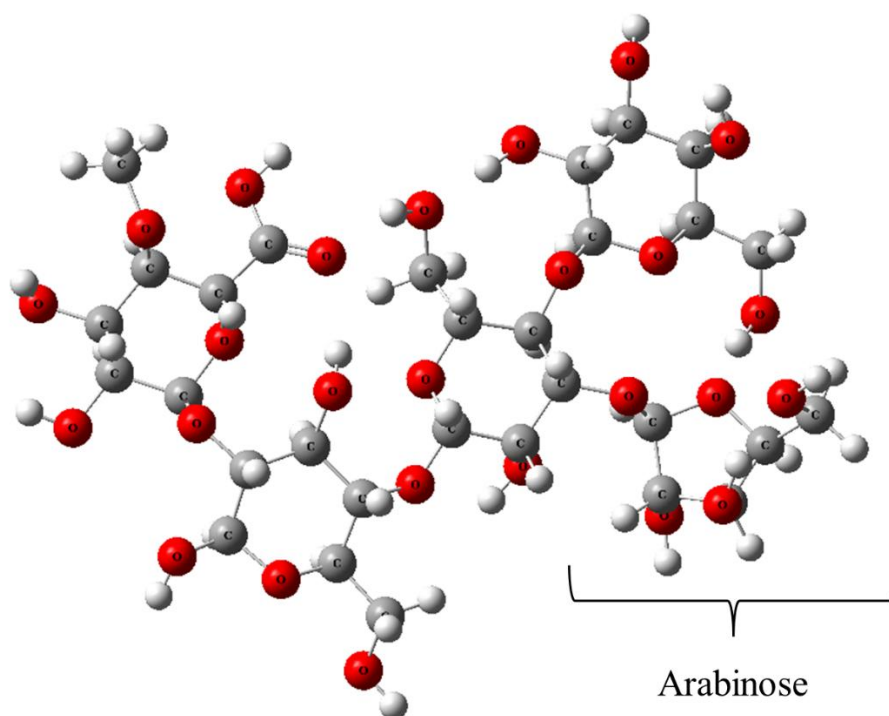
3 METODOLOGIA

Neste trabalho foram utilizados três biopolímeros: celulose, hemicelulose e lignina. Para a simulação da celulose (CE) foram considerados três monômeros de unidades β -D-glucopiranosose ([Figura 1.a](#)); Na simulação da hemicelulose foram consideradas três unidades monoméricas de monômeros xilanos com ramificação de uma pentose: arabinose, como matriz Hm1 ([Figura 1.b](#)) e as mesmas três unidades sem ramificação foi utilizada como matriz Hm2 ([Figura 1.c](#)); e da lignina foi seguida a metodologia da estrutura descrita por (Santos et al., 2022), em que foi utilizada a estrutura da lignina contendo o GS (coniferil e sinapil) ([Figura 1.d](#)). Os cortes nos biopolímeros foram feitos nos oxigênios e a valência foi completada com hidrogênios. Para o UO_2^{2+} do qual é a forma de urânio mais estável e prevalente termodinamicamente no ambiente, sua estrutura linear ($\text{O}=\text{U}=\text{O}^{2+}$) foi considerada gerada pela hibridização dos orbitais 5f e 6d do urânio. Como a especiação de U de acordo com o pH na presença de água muda, o íon uranila livre foi considerado com pH neutro na água aquosa (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022; Jun et al., 2021; Xie et al., 2019).

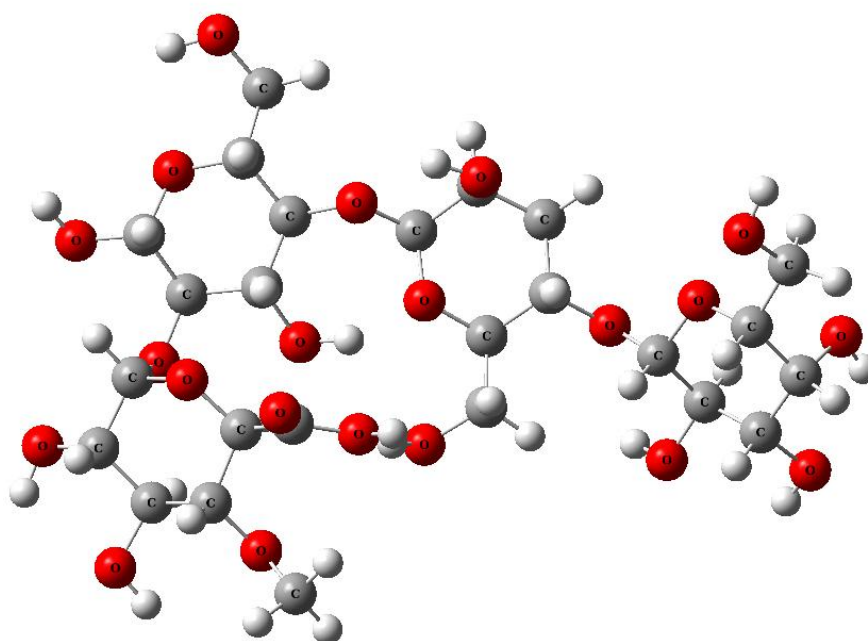
Figura 1. Estruturas estudadas de a) celulose, b) Hm1, c) Hm2 e d) lignina.



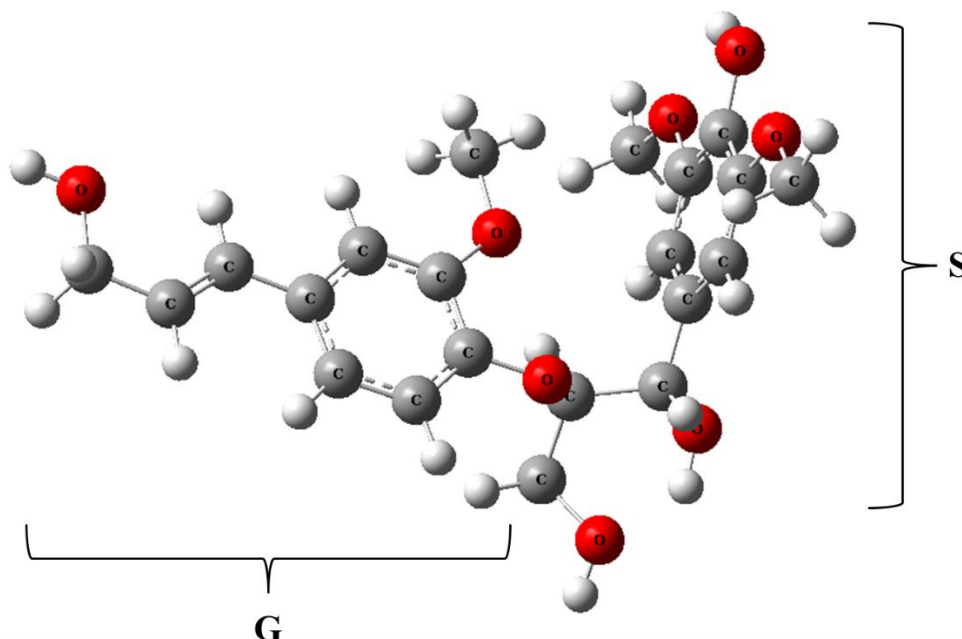
b) Hm1



c) Hm2



d) Lignina (GS)



Autor, 2026.

As estruturas foram construídas utilizando o software GaussView 5.0 (Dennington; Keith; Millam, 2009), submetidas a cálculos teóricos em nível de teoria do funcional da densidade (*Density Functional Theory*, DFT) com método funcional híbrido B3LYP (Becke, 1993; Lee; Yang; Parr, 1988; Stephens et al., 1994) e com conjunto de função de base SDD (Stuttgart/Dresden) (Cao; Dolg, 2004; Cao; Dolg; Stoll, 2003; Feller, 1996; Küchle et al., 1994; Pritchard et al., 2019; Schuchardt et al., 2007). Essa base atômica é um conjunto de potencial central efetivo (*Effective Core Potential*, ECP) que trata os elétrons internos como um único potencial efetivo atuando sobre os elétrons de valência, o que reduz custo computacional e é eficaz para elementos pesados como o urânio (Küchle et al., 1994). A escolha desse conjunto de função de base prova-se eficiente para cálculos teóricos para diferentes trabalhos citados na literatura usando o UO_2^{2+} descrevendo bons valores de energia e frequência em comparação com valores experimentais (Bühl; Sieffert; Wipff, 2014; Di Bernardo et al., 2012; Rios et al., 2012; Sharfalddin et al., 2021)

Os cálculos foram realizados no Gaussian 16 (Frisch et al., 2016) na ausência de frequência imaginária, demonstrando que as estruturas estavam em estado de mínimo de energia. O efeito da água como solvente implícito foi considerado usando o modelo do contínuo

polarizável (*Polarizable Continuum Model*, PCM). Para os cálculos de interação foi utilizado o efeito de dispersão empírica D3 (Grimme et al., 2010).

Utilizando as estruturas otimizadas no nível da teoria B3LYP/SDD das matrizes e complexos isolados estudados, foram determinadas a energia de ligação (ΔE_{Bind}), entalpia ($\Delta_r H$) e a energia de Gibbs ($\Delta_r G$) reacionais, conforme as Equações [1](#), [2](#) e [3](#) respectivamente.

$$\Delta E_{\text{Bind}} = E_{\text{Complexo}} - (E_{\text{Adsorvente}} + E_{\text{UO}_2^{2+}}) \quad (\text{Eq. 1})$$

$$\Delta_r H = H_{r\text{Complexo}} - (H_{r\text{Adsorvente}} + H_{r\text{UO}_2^{2+}}) \quad (\text{Eq. 2})$$

$$\Delta_r G = G_{r\text{Complexo}} - (G_{r\text{Adsorvente}} + G_{r\text{UO}_2^{2+}}) \quad (\text{Eq. 3})$$

Para caracterizar as interações do UO_2^{2+} com as matrizes foi utilizado da Teoria Quântica de Átomos em Moléculas (*Quantum Theory of Atoms in Molecules*, QTAIM), em que foi analisado a natureza das interações a partir de um ponto localizado entre dois átomos conhecido como ponto crítico de ligação (*Bond Critical Point*, BCP). O BCP é formado a partir da interação entre átomos gerando trajetórias de gradiente de densidade (Bader; Essén, 1984; Bader, 1990, 1991). A partir disso, essa interação gerada fornece característica com relação a ligação entre os átomos, sendo descritas no BCP por parâmetros como: densidade eletrônica ($\rho_{(r)}$), laplaciano da densidade eletrônica ($\nabla^2_{\rho_{(r)}}$), energia cinética da densidade eletrônica ($G_{(r)}$), energia potencial da densidade eletrônica ($V_{(r)}$) e energia total da densidade eletrônica ($H_{(r)}$) ([Equação 4](#)) (Bader; Essén, 1984; Bader, 1990, 1991; Grabowski, 2013). A presença de ligações de hidrogênio (E_{HB}) é dada pelo meio do módulo da energia potencial eletrônica no BCP ([Equação 5](#)) (Bader; Essén, 1984; Bader, 1990, 1991). Para a realização dessas análises foi utilizado o pacote AIMALL (Keith, 2017).

$$H_{(r)} = G_{(r)} + V_{(r)} \quad (\text{Eq. 4})$$

$$E_{\text{HB}} = 0,5|V_{(r)}|_{\text{BCP}} \quad (\text{Eq. 5})$$

Também foram realizados análises de Interações Não-Covalentes (*Non-covalent interaction*, NCI) que é baseado no método de Gradiente de Densidade Reduzida (*Reduced Density Gradient* - RDG) expresso na [Equação 6](#) (Hajji et al., 2021; Johnson et al., 2010; Jumabaev et al., 2023).

$$\text{RDG} = \frac{1}{2(3\pi^2)^{1/3}} \frac{|\nabla\rho(r)|}{\rho(r)^{4/3}} \quad (\text{Eq. 6})$$

Em $\rho(r)$ é a densidade eletrônica e $\nabla\rho(r)$ é o gradiente da densidade eletrônica.

A partir do NCI pode-se obter a visualização de isosuperfícies que exibem um esquema de codificações de cores, em que azul indica interações fortemente atrativas ou ligações de hidrogênio, vermelho para interações repulsivas (efeito estérico) e as cores verdes para interações intermediárias sendo interações de Van der Waals (Hajji et al., 2021; Johnson et al., 2010; Jumabaev et al., 2023).

O gráfico dos gradientes reduzidos (RDG) vs a densidade eletrônica ($\rho(r)$) multiplicada pelo sinal (sign) do segundo autovalor da matriz Hessiana (λ_2) permite identificar o tipo de interação não-covalente caracterizada em regiões de baixo gradiente de densidade reduzido na estrutura do sistema estudado, em que: valores onde $\lambda_2 < 0$ e $\rho(r) > 0$ representam interações fortes ou ligações de hidrogênio; $\lambda_2 > 0$ e $\rho(r) > 0$ forças repulsivas exibindo efeito estérico e $\lambda_2 \approx 0$ e $\rho(r) \approx 0$ interações intermediárias, correspondentes a interações de Van der Waals (Azayez et al., 2024; Boto et al., 2016). As análises foram realizadas usando o programa Multiwfn (Lu; Chen, 2012), e os programas Visual Molecular Dynamics (VMD) (Humphrey; Dalke; Schulten, 1996) e Gnuplot foram usados para gerar as figuras de isosuperfície e RDG, respectivamente.

4 REFERÊNCIAL TEÓRICO

4.1 Mudanças Climáticas e a Necessidade de Energias Renováveis

A energia elétrica é fundamental para o desenvolvimento econômico e humano (Mathew, 2022). Em 2024, de acordo o relatório da Ember Energy (Graham; Fulghum; Altieri, 2025), a demanda elétrica global foi em torno de 30.856 TWh, eletricidade essa produzida através de combustíveis fósseis, energia nuclear, energia solar, eólica e por hidroelétricas (Graham; Fulghum; Altieri, 2025). Porém, a produção dessa energia e seu uso é a maior fonte de emissões de gases de efeito estufa que são responsáveis pelas mudanças climáticas, pois desde a década de 70, a geração de energia elétrica e seu uso em produções industriais, contribuíram em aproximadamente 70% do total de emissões dos gases de efeito estufa, como o CO₂ (Mathew, 2022).

Devido a esses impactos, houve os acordos internacionais entre países, como Acordo de Paris em 2015, para atingir metas climáticas e ações mitigatórias para manter o aquecimento global abaixo de 1,5°C até 2050 (Pastore; De Santoli, 2025; “The Paris Agreement”, 2020; “The Paris Agreement | UNFCCC”, 2019). Para atingir essas metas é necessário mudanças significativas em que cerca de 80% da eletricidade global deverá ser gerada por fontes de baixo carbono (Mathew, 2022). No Brasil, essa realidade pode ser alcançada em 2040 de acordo com o estudo *Brazil Net-Zero by 2040*, coordenado pelo Instituto Amazônia 4.0 (Nobre et al., 2025). A iniciativa utilizou o *Brazilian Land Use and Energy System Model (BLUES)*, para simularam diferentes cenários de mitigação, em que para o estudo foi comparado dois cenários: i) o AFOLU-2040 que se baseia-se em agricultura, florestas, focando em soluções como reflorestamento, sistemas agroecológicos e ii) o Energy-2040 que é focado na transição energética e baseia-se na eletrificação e descarbonização do transporte (Nobre et al., 2025). Os autores mostram que para os dois cenários se tornarem reais, ambos exigem a coordenação intersetorial e parcerias públicos-privadas além de investimentos consistentes (Nobre et al., 2025).

Neste contexto, as energias renováveis são essenciais por serem derivadas de fontes naturais e gerarem baixas emissões de gases estufas em sua produção. De acordo os dados publicados por Ember Energy (Graham; Fulghum; Altieri, 2025), em 2024 a energia limpa ultrapassou 40% da geração global de eletricidade, atendendo a 79% do aumento da demanda global de eletricidade, e essas fontes mostram que a energia solar e eólica combinada representaram 15% da eletricidade global (Graham; Fulghum; Altieri, 2025). Em 2024, a Ember

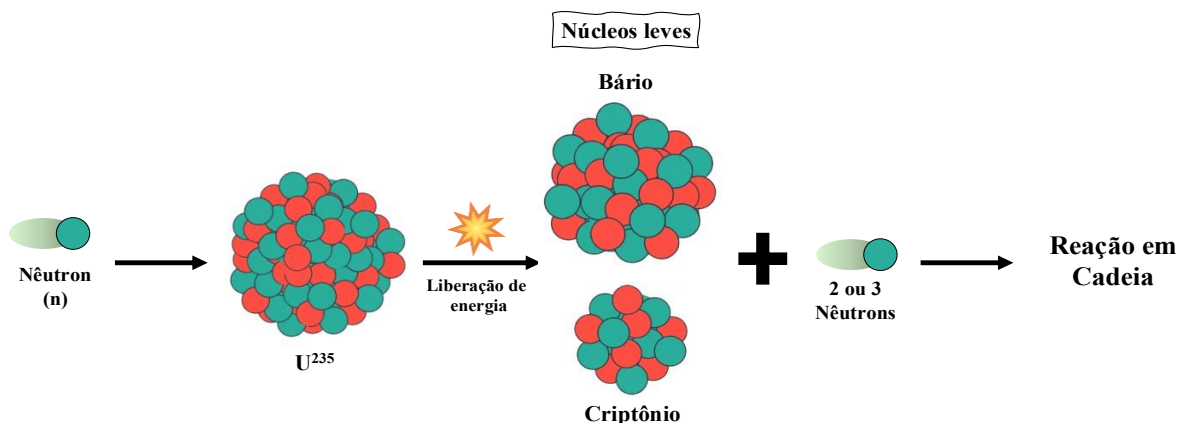
Energy também evidenciou que 90% da eletricidade do Brasil foi gerada de fontes de baixo carbono, sendo 50% hidrelétrica, solar e eólica que somadas contribuíram em 24% (Graham; Fulghum; Altieri, 2025).

Apesar do notável progresso das fontes de energia solar, eólica e hidrelétrica elas podem ser afetadas pelas mudanças climáticas, além de enfrentarem problemas em questão de disponibilidade intermitente, a limitação do seu custo-benefício e complexidades de infraestrutura (Mathew, 2022). Assim, a energia nuclear se destaca, não só por ser um método de produção de energia com baixa emissão de carbono, como também eficiência de custos e fornecimento contínuo de energia, entre outros benefícios (Barrera Giraldo et al., 2025; Faizan et al., 2024; Mathew, 2022).

4.2 ENERGIA NUCLEAR

O desenvolvimento da energia nuclear surge na primeira metade do século XX, com a descoberta da fissão nuclear por Hahn e Strassmann em 1939 (Hahn; Strassmann, 1939), que evidenciou que núcleos muito pesados podiam se dividir em elementos mais leves como criptônio e bário, como mostra a [Figura 2](#). Essa divisão gera uma liberação de energia muito alta, além da reação produzir uma reação em cadeia em que os nêutrons incidentes atingem outros núcleos de urânio (Quiroga-Barriga et al., 2025). Tal descoberta foi impulsionada com o começo da Segunda Guerra Mundial, uma vez que a energia nuclear foi utilizada para fins militares com o desenvolvimento das bombas nucleares, marcando o início da era atômica (Quiroga-Barriga et al., 2025).

Figura 2. Fissão nuclear do urânio.



Autor, 2026.

O uso do urânio na geração de energia nuclear começa após o final da Segunda Guerra Mundial, quando o foco do uso da energia gerada pela fissão, passa a ser aproveitada de forma controlada para produção de eletricidade e para propulsão naval (Hore-Lacy, 2007). Em 1951, nos EUA, foi criado o primeiro reator nuclear com capacidade de produzir eletricidade, porém em quantidades pequenas e triviais (Hore-Lacy, 2007). Na antiga União Soviética, em 1963, o primeiro gerador de eletricidade nuclear do mundo foi fabricado, o chamado reator AM-1 (*Atom Mirny*) com uma capacidade de 5MWe (Hore-Lacy, 2007). Então, a partir de 1960, o uso comercial da energia nuclear cresceu com a utilização de reatores como o PWR (*Pressurized Water Reactor*) e o BWR (*Boiling Water Reactor*) (Hore-Lacy, 2007). O uso do urânio na geração de energia nuclear começa após o final da Segunda Guerra Mundial, quando o foco do uso da energia gerada pela fissão, passa a ser aproveitada de forma controlada para produção de eletricidade e para propulsão naval (Hore-Lacy, 2007). Em 1951, nos EUA, foi criado o primeiro reator nuclear com capacidade de produzir eletricidade, porém em quantidades pequenas e triviais (Hore-Lacy, 2007). Na antiga União Soviética, em 1963, o primeiro gerador de eletricidade nuclear do mundo foi fabricado, o chamado reator AM-1 (*Atom Mirny*) com uma capacidade de 5MWe (Hore-Lacy, 2007). Então, a partir de 1960, o uso comercial da energia nuclear cresceu com a utilização de reatores como o PWR (*Pressurized Water Reactor*) e o BWR (*Boiling Water Reactor*) (Hore-Lacy, 2007).

Ao longo do tempo, as usinas nucleares passaram a ser utilizadas como um meio viável de produção e fornecimento contínuo de energia, possuindo uma alta eficiência de custos e fornecimento contínuo (Faizan et al., 2024). Porém, a preocupação com a segurança desse método de produção de energia exige uma atenção significativa (Kaltsoyannis; Liddle, 2016). A percepção pública negativa da energia nuclear, além da sua ligação a armamentos nucleares, está ligada aos acidentes que ocorreram em Three Mile Island, Chernobyl e Fukushima, acidentes esses que definiram as décadas seguintes com a desaceleração de novas implementações de usinas nucleares (Klingelhöfer et al., 2024; Quiroga-Barriga et al., 2025).

Com o surgimento de novas tecnologias, a energia nuclear evoluiu de várias gerações de reatores até a Geração III e III+, que estão em operação desde o início de século XXI. Estes geradores são projetos modulares, com sistemas de segurança passiva e vida útil estendida (Quiroga-Barriga et al., 2025; Zohuri, 2020). Em 2024, a energia nuclear compôs 9% da matriz global de eletricidade, gerando em torno de 2.768 TWh, onde se têm os Estados Unidos da América (EUA) como o maior produtor de energia nuclear com 782 TWh, seguido da China com 445 TWh e França com 379 TWh (Graham; Fulghum; Altieri, 2025).

4.2.1 Energia Nuclear no Brasil

No Brasil, a trajetória na área nuclear começa em 1951 sob o comando do recém-criado Conselho Nacional de Pesquisas (CNPq) na época tendo como primeiro presidente o almirante Álvaro Alberto da Mota e Silva. No entanto, somente em 1970 houve a abertura de uma licitação para a construção da primeira usina nuclear, sob o regime militar (“*Nuclear Power in Brazil - World Nuclear Association*”, 2025; Ribeiro Kuramoto; Appoloni, 2002). Logo em 1971 começa a construção da usina em Angra dos Reis no estado do Rio de Janeiro, pela empresa norte americana *Westinghouse*, se tornando a primeira usina nuclear do país, a Angra 1, com início de operação em 1985 (“*Nuclear Power in Brazil - World Nuclear Association*”, 2025; Ribeiro Kuramoto; Appoloni, 2002).

Em 1975, o governo adotou uma política de autossuficiência em um acordo com a Alemanha para fornecimento de oito unidades nucleares para construção imediata de Angra II e Angra III, mas de acordo Kuramoto e Appoloni, 2002, as justificativas por trás desse acordo eram de maior vantagem aos alemães, por estarem procurando na época novos mercados para o setor nuclear, além disso, interesse nas reservas de urânio do Brasil (Ribeiro Kuramoto; Appoloni, 2002). Com isso, a primeira crítica sobre o acordo veio através da Sociedade Brasileira de Física (SBF) questionando o procedimento e mostrando que o acordo era desfavorável ao Brasil, o que levou a uma grande repercussão e o encerramento do acordo em 1985. A responsabilidade de construção de Angra II e III foi passada para *Furnas Centrais Elétricas SA* (Furnas), subsidiária da Eletrobrás (“*Nuclear Power in Brazil - World Nuclear Association*”, 2025; Ribeiro Kuramoto; Appoloni, 2002). No entanto, atualmente, apenas Angra II e III estão em funcionamento, representando cerca de 2% do painel elétrico nacional, em 2024, foi responsável por gerar cerca de 15,7 TWh de energia (Graham; Fulghum; Altieri, 2025).

4.3 Urânio

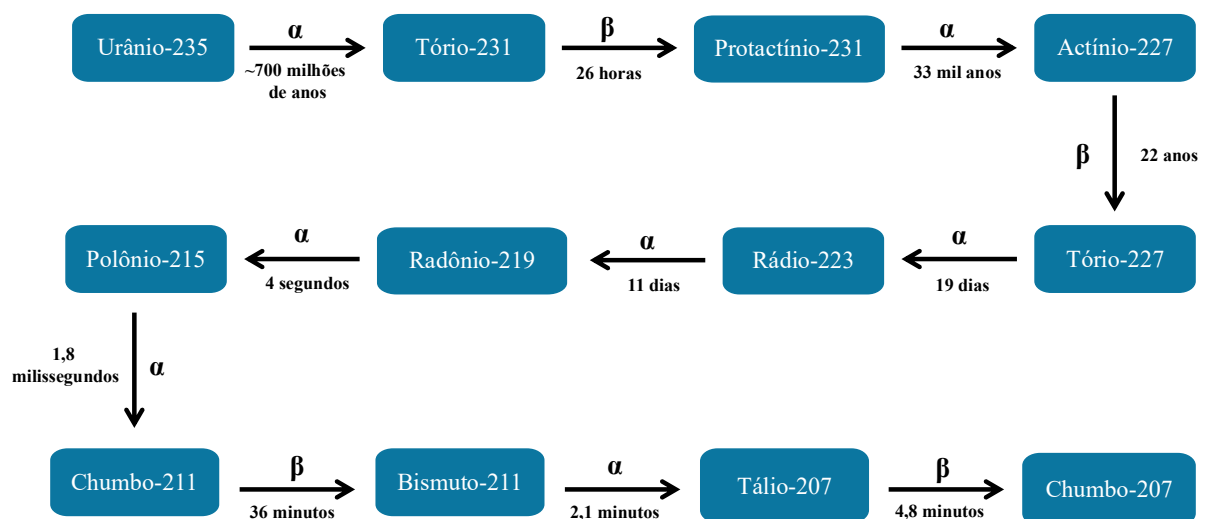
O urânio (U) é o elemento 92 da tabela periódica, pertencente aos actinídeos e principal matéria prima dos combustíveis nucleares. Sua descoberta foi atribuída a Martin Heinrich Klaproth em 1789, pela precipitação de um composto amarelo obtido da dissolução de mineral de urânio. Porém, em 1841, a primeira amostra de urânio metálico foi isolada por Eugène Peligot e sua radioatividade foi descoberta por Henri Becquerel em 1896, quando ele deixou

uma amostra de urânio sobre uma placa fotográfica não exposta, levando Becquerel a deduzir que o elemento emitia raios invisíveis (Grenthe et al., 2006).

O urânio é encontrado na natureza em rochas, solo e corpos d'água, quase tão abundante quanto o estanho (Faqir et al., 2025; Settle, 2009). Assim como todo composto, o urânio tem diferentes isótopos, sendo três naturais: urânio-234 (U-234), urânio-235 (U-235) e urânio-238 (U-238). O U-238 é o mais comum e o U-235 é o isótopo utilizado nas maiorias dos reatores nucleares (Keith; Faroon, 2022; Settle, 2009). Sua forma mais comum de mineral é a pechblenda, conhecida também como uraninita, composta majoritariamente por UO_2 . Para fazer uso do urânio-235, é realizado o enriquecimento do urânio natural U-238, uma vez que as concentrações naturais de U-235 são baixas, da ordem de 0,07% (Settle, 2009).

Os isótopos U-235 e U-238 são comumente usados em ciências geológicas como geocronômetro devido às suas longas meias-vidas e por decaírem em um isótopo de chumbo estável (Kyser, 2016). Os produtos de decaimento ao longo da cadeia do U-235 resultam no isótopo estável do chumbo-207, porém, para o U-235 decair até o chumbo leva cerca de mais de 700 milhões de anos (Kyser, 2016), como mostra a [Figura 3](#).

Figura 3. Ciclo de Decaimento do U-235.

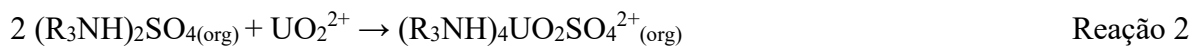


Autor, 2026.

As propriedades geoquímicas dos produtos de decaimento são distintas, porém, a presença de alguns elementos como Radônio, Bismuto e Rádio, podem indicar mineralização enterrada, ajudando na identificação dos depósitos de urânio (Kyser, 2016).

4.3.1 Ciclo do Combustível Nuclear

O processo de isolamento do urânio se inicia com o minério sendo triturado e moído, onde logo após é exposto a uma solução de lixiviação composta geralmente de ácidos, porém, pode variar de acordo com a geoquímica do depósito (Collier, 2016; Settle, 2009). Por exemplo, minérios com altas concentrações de silicatos são lixiviados com ácido sulfúrico (H_2SO_4) para produzir íon uranila, UO_2^{2+} , solúvel em água (Settle, 2009). Para extrair o urânio da solução lixiviada, pode ser utilizadas técnicas de extração contínua por solvente, utilizando aminas terciárias (R_3N) que foram dissolvidas em querosene (gerando o sulfato de amina, que extrai os íons uranila para fase orgânica, deixando que as impurezas permaneçam na fase aquosa ([Reação 1 e 2](#)) (Settle, 2009).



Após esse processo, os solventes são removidos por evaporação e o diuranato de amônio $(\text{NH}_4)_2\text{U}_2\text{O}_7$ é precipitado e aquecido para produzir um sólido concentrado de composição de U_3O_8 , conhecido como *yellowcake* (Benedict, 1981; Settle, 2009).

Na troca iônica, o processo é realizado pela passagem do urânio em uma resina, em que há a troca do urânio que sofreu o processo de lixiviação com carbonato de amônio $(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$ e está na forma do íon solúvel $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$, por um outro íon negativo como o cloreto, para então ser produzido o *yellowcake* (Benedict, 1981; Kyser, 2016).

A lixiviação *in situ* surgiu no século XXI, para substituir a mineração, sendo o método mais comum utilizado para obtenção do urânio (Pelizza; Bartels, 2016; Settle, 2009). Esse processo consiste na circulação de água subterrânea oxigenada com agentes complexantes ou oxidantes por depósitos subterrâneos de urânio, dissolvendo-o diretamente neste depósito (Pelizza; Bartels, 2016; Settle, 2009). Em seguida, a solução é extraída e refinada para produzir o *yellowcake*.

O *yellowcake* é a matéria prima pós processamento do urânio, para produção do combustível nuclear (Benedict, 1981). Esse pó concentrado de urânio, passa pelo processo de dissolução em ácido nítrico (HNO_3), resultando em nitrato de uranila que em seguida é extraído para fase orgânica (Settle, 2009). Após isso, o urânio é lavado novamente com HNO_3 diluído e concentrado na forma de nitrato de uranila puro que, quando aquecido, produz UO_3 puro (Benedict, 1981; Settle, 2009). Porém, na sua utilização como combustível, o urânio precisar

estar em uma concentração isotópica de U-235 de pelo menos 3 a 5%, que são os chamados urânio pouco enriquecidos (Settle, 2009).

O enriquecimento do urânio envolve processos físicos e químicos, em que os métodos de centrifugação e difusão requerem que este esteja em forma gasosa como o hexafluoreto de urânio (UF₆) (Vieira et al., 2024). Para preparar este gás, o UO₃ concentrado obtido é reduzido com hidrogênio ([Reação 3](#)) formando o dióxido de urânio (UO₂), que então reage com fluoreto de hidrogênio (HF) para formar o tetrafluoreto de urânio (UF₄) ([Reação 4](#)). Este, por sua vez é alimentado em um reator com flúor gasoso obtendo o UF₆ ([Reação 5](#)) (Settle, 2009; Vieira et al., 2024).



O gás UF₆ produzido é passado pelo processo de enriquecimento que normalmente é feito por centrifugação, onde o gás é bombeado para cilindros giratórios de alta velocidade, em que o isótopo U-235 permanece no centro e o U-238 é empurrado para paredes dos cilindros, permitindo essa separação (Settle, 2009; Tarakanov, 2023). Quando se tem a proporção U-235 suficiente, o gás passa por um processo de reconversão e o isótopo é transformado em pó de UO₂ (Settle, 2009). Este pó é transformado em pastilhas cilíndricas uniformes, e são seladas em tubos feitos de uma liga contendo zircônio, estanho e outros metais (Settle, 2009).

Uma vez nos reatores, uma pastilha de combustível dura cerca de 3 a 5 anos, sendo que a cada 18 meses, aproximadamente, um terço do conjunto de combustível é trocado (Settle, 2009). A forma final do combustível irradiado, aquele que foi retirado dos reatores, depende se o ciclo é fechado ou aberto. No ciclo aberto, o combustível nuclear irradiado fica sem tratamento e é considerado um resíduo (Fernández-Arias; Vergara; Antón-Sancho, 2023). São armazenados em sub piscinas ou armazenados em containers seco até o resfriamento, cerca de 1 ano. Logo após o combustível é guardado em um cilindro selado utilizando concreto e aço para conter a radiação (Settle, 2009). Países como EUA, Alemanha utilizam este sistema de gestão (Fernández-Arias; Vergara; Antón-Sancho, 2023). Em ciclos fechados, o combustível usado é tratado para ser reutilizado ou ter o descarte adequado (Fernández-Arias; Vergara; Antón-Sancho, 2023). Esse processo inclui deixar os disquetes de combustível sob enterrados em uma piscina por cerca de 5 até 25 anos para diminuir sua radiação e então passam por reprocessamento, podendo extrair novamente o urânio e submetê-lo a conversão para UF₆

fazendo o aproveitamento deste material (Settle, 2009). Países como Brasil, França, Japão, Rússia, entre outros, optam pela gestão com ciclo fechado (Fernández-Arias; Vergara; Antón-Sancho, 2023).

Atualmente, existem diferentes tecnologias para o gerenciamento de resíduos nucleares, que consistem em reprocessamento; armazenamento em repositórios geológicos profundo, temporário, úmido ou seco; e descarte (Fernández-Arias; Vergara; Antón-Sancho, 2023). Porém, há problemas com o combustível irradiado a base de UO_2 ao ser descartado em um repositório subterrâneo, por exemplo, há estudos que mostram que após milhares de anos de armazenamento, é possível que a água subterrânea pode se infiltrar no local de instalação e interagir com o combustível, permitindo a liberação do urânio e derivados radionuclídeos para o meio ambiente (Rodríguez-Villagra et al., 2023). Com isso, a problemática envolvendo a presença do urânio movimentada por mineralização e uso nuclear é uma preocupação ambiental (Jun et al., 2025; Mathivanan et al., 2022; Rana et al., 2016).

4.3.2 Problemáticas Ambientais do Urânio

O urânio, a principal matéria prima utilizada na energia nuclear, é um elemento perigoso aos seres humanos e de difícil descarte (Fernández-Arias; Vergara; Antón-Sancho, 2023). Além de radioativo, o urânio também apresenta quimiotoxicidade aos seres humanos tendo efeito potencialmente nocivo em vários órgãos, podendo se acumular no corpo ameaçando os rins, além disso, uma exposição prolongada ao elemento pode afetar a saúde óssea devido a emissão das partículas alfa produzidas pelos componentes radioativos do urânio (Faqir et al., 2025; Jha et al., 2024). O urânio pode atingir o sistema respiratório caso haja inalação de partículas de urânio, causando câncer de pulmão e ainda o fígado afetando os processos metabólicos do órgão (Faqir et al., 2025).

O urânio pode estar presente no ar, água e solo (Abolli et al., 2024). O desenvolvimento e ampliação do uso da energia nuclear, promove um aumento da liberação e do descarte dos resíduos gerados nas usinas nucleares no meio ambiente e a extração de minérios contendo urânio (Gavrilescu; Pavel; Cretescu, 2009). A presença do urânio no meio ambiente pode ser dada de fontes naturais ou antropogênicas, contribuindo para a contaminação das águas subterrâneas, solo, e outros meios (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022; Gavrilescu; Pavel; Cretescu, 2009; Wufuer et al., 2025).

Fatores como rebaixamento de lençol freático, poluição por nitratos e presença de carbonatos aceleram e modificam a concentração de U em águas subterrâneas, além disso, a

mineração e processamento de rochas fosfáticas e minérios de urânio, uso de fertilizantes fosfatados contendo U, fundição de metais, extração de tório, auxiliam na liberação do U natural para o ambiente e sistemas aquáticos próximos a essas atividades (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022; Jun et al., 2025). O urânio, ainda ocorre tipicamente em efluentes de águas residuárias industriais, especialmente de usinas nucleares e industriais de processamento de urânio (Jun et al., 2025).

Globalmente, 3 bilhões de pessoas utilizam a água subterrânea como principal fonte de água potável por considerarem essa água mais confiável em termos de qualidade e quantidade, porém, a presença do U nessas águas podem apresentar problemáticas ambientais graves e por isso é necessário a remoção e imobilização do U no tratamento de água subterrânea, efluentes industriais e da água potável (Abolli et al., 2024; Gavrilesco; Pavel; Cretescu, 2009; Jun et al., 2025; Paradis et al., 2022; Rana et al., 2016).

4.4 Íon Uranila (UO_2^{2+})

O urânio possui diferentes estados de oxidação naturais: +3, +4, +5 e +6, porém em ambientes aquáticos a predominância é para os estados tetravalente (U(IV)) e hexavalente (U(VI)), sendo o primeiro pouco solúvel e com pouca mobilidade. Em contraponto, o U(VI) é solúvel em água, possui alta mobilidade e é tóxico para o meio ambiente (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022; Mathivanan et al., 2022).

O íon uranila (UO_2^{2+}) é a forma mais estável termodinamicamente e prevalente do urânio no meio ambiente (Arnold; Love; Patel, 2009). Essa estrutura pode formar diversos complexos aquosos com constituintes presentes em água subterrânea como o hidróxido e o carbonato, além de outras formas solúveis com íons fluoretos (UO_2F_2), nitratos ($\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2$), cloretos (UO_2Cl_2), acetatos e sulfato de uranila, dentre outros. O UO_2^{2+} possui uma estrutura linear ($\text{O}=\text{U}=\text{O}^{2+}$), gerada a partir da hibridização dos orbitais 5f e 6d do urânio, podendo se coordenar com átomos no plano equatorial perpendicular a estrutura, formando estruturas do tipo bipiramidais quadriláteras, pentagonais ou hexagonais (Wang; Zhuang, 2019).

Em águas subterrâneas, os processos geoquímicos naturais envolvendo a dessorção e dissolução de minerais como silicatos, fosfatos, hidróxidos de (oxi)Fe-Mn, são os principais responsáveis pela mobilidade do U no meio aquoso subterrâneo (Alam; Cheng, 2014; Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022). As altas concentrações envolvendo o U, é devido as espécies lixiviadas de U(VI) de rochas em diferentes condições oxidativas, em que essas espécies podem ser redepositadas e precipitadas em ambientes redutores, gerando o comportamento químico

dinâmico do U, fazendo a alternância entre fase sólida e dissolvida, facilitando essa mobilidade em meio aquoso, adjunto dos complexos muito solúveis do U com cálcio e carbonato, que são altamente solúveis (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022; Ulrich et al., 2019).

A especiação do U de acordo o pH na presença de água e carbonato pode ser dada da seguinte forma: em pH ácido ($\text{pH} < 5$) a espécie UO_2^{2+} predomina; quando se tem um meio neutro, a espécie UO_2 predomina e em ambiente também levemente redutor; em pH básico ($\text{pH} > 7$) as espécies de complexos aniônicos de urânio com carbonato, como $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$ e $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$ predominam (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022; Jun et al., 2021; Xie et al., 2019). Logo, saber a especiação do U em solução é essencial para a compreensão dos mecanismos de remoção do U pelas diferentes tecnologias de tratamento (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022).

Existem diferentes tecnologias de remoção do U(VI) do meio ambiente (Hossain, 2020; Ighalo et al., 2024; Prusty et al., 2022), como:

- **Filtração por membranas e osmose reversa**, das quais são altamente eficazes para remoção do U. É um mecanismo promissor, porém em corpos d'água há diferentes íons, metais e sais, o que complica a separação de membrana e pode haver cenários em que é necessário ajuste de pH, com elevados custos de reagentes para sistemas de alta capacidade, dificultando sua aplicação (Ighalo et al., 2024); Também é um processo que demanda energia.
- **Eletrocoagulação**, a qual permite a coagulação e floculação do U(VI) gerando menos lodo que a coagulação convencional devido a menor adição de reagentes para a imobilização do U, promovem também a geração de radicais hidroxila *in situ* que contribuem para mineralização de compostos orgânicos. É uma tecnologia promissora, mas envolve alta demanda de energia para seu uso em larga escala para fazer o processo da eletrocoagulação (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022);
- **Troca iônica**, dentre os processos químicos é a mais utilizada. Essa técnica gera espécies iônicas de urânio que se associam as resinas aniônicas ou catiônicas em diferentes valores de pH (Ighalo et al., 2024; Karan; Rajan; Sreenivas, 2019). Por estarem em fase sólida, uma vez haja a interação da urânio com as resinas, não há necessidade de separação adicional, não forma lodo e não requer energia (Ighalo et al., 2024). Dentre os processos, pode ser considerada uma das melhores técnicas para a remoção do urânio, junto com a adsorção;

- **Fotocatálise**, técnica que envolve a redução do U(VI) que é solúvel para o U(IV) que é menos solúvel através de semicondutores sob luz. É uma técnica eficaz, porém, há a necessidade de separação do semicondutor do urânio, ocasionando etapas adicionais, além do desafio associado a recombinação elétron-buraco na maioria dos fotocatalisadores (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022; Ighalo et al., 2024);
- **Tratamento biológico**, utiliza de bactérias, fungos ou algas para reduzir ou até mesmo adsorver o urânio, impactando na mobilidade e disponibilidade do mesmo. Porém são processos lentos e muito sensíveis a variação de temperatura e pH, o que exige monitoramento e controle rigoroso dos parâmetros por longos períodos e tem uma menor eficiência em comparação as outras técnicas (Ighalo et al., 2024; Levy-Ontman et al., 2023; Tsuruta, 2002);
- **Adsorção**, que é considerada um dos métodos mais eficazes para remoção do U por ser simples, de baixo custo e acessível além de ser um processo ecologicamente correto. Porém, possui desafios de reutilização do adsorvente em múltiplos ciclos antes de perder a sua capacidade de adsorção (Hossain, 2020; Ighalo et al., 2024; Prusty et al., 2022).

4.5 Adsorção

A adsorção é um processo que envolve a transferência de massa de substâncias presentes em uma fase líquida ou gasosa para uma superfície sólida, em que as substâncias que se aderem a superfície são chamadas de adsorvatos e o sólido, é chamado de adsorvente (Chen et al., 2022). A interação entre adsorvato e adsorvente pode ser dada em dois tipos: a) adsorção física (fisissorção), que é caracterizada por forças de interação mais fracas, como forças de van der Waals, resultando na formação de uma multicamada de adsorvato no adsorvente; b) adsorção química (quimissorção), que é caracterizada por interações mais fortes, por meio de ligações químicas, como ligações covalentes ou iônicas, resultando na formação de uma monocamada de adsorvato no adsorvente (Chen et al., 2022).

A técnica de adsorção é extensivamente utilizada para a remoção do urânio, por ser econômica, eficaz e de fácil implementação (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022; Hokkanen; Bhatnagar; Sillanpää, 2016; Prusty et al., 2022; Xie et al., 2019). Quando comparada a outros métodos, esse se destaca por oferecer vantagens práticas e operacionais e por possuir versatilidade devido à grande variedade de materiais adsorventes e técnicas de melhoria de

adsorção para estes materiais. Possui um baixo custo inicial, muitos adsorventes podem ser obtidos de fontes baratas, como biomassas e leva à geração de pouco ou nenhum resíduo secundário, fazendo que a adsorção se torne a técnica preferencial de remoção do urânio (VI) do meio aquoso (Gandhi; Sampath; Maliyekkal, 2022; Hokkanen; Bhatnagar; Sillanpää, 2016; Prusty et al., 2022; Xie et al., 2019).

A adsorção do urânio envolve a transferência do UO_2^{2+} para a superfície de um adsorvente, em que condições como pH da solução, competição iônica, a concentração de carbonatos, temperatura, concentração do adsorvato e adsorvente, tempo de contato, propriedades e tipo de adsorvente pode interferir neste processo (Xie et al., 2019). Com isso, o mecanismo de remoção do urânio é dado pela complexação do urânio na superfície, troca iônica e interação eletrostática, processos que são dados pela afinidade entre o íon uranila e grupos funcionais doadores de elétrons, como aminas, hidroxilas, carboxílicos e fosfatos, que estão presentes no adsorvente de acordo com sua composição química (Xie et al., 2019).

Como exemplo, Munagapati et al, 2025, estudaram a síntese da quitosana modificada por amina (*amine-modified chitosan, AMC*) para adsorção do íon uranila (Munagapati et al., 2025). A AMCS, teve maior eficiência de remoção do U(VI) em condições de pH = 5, com uma remoção de 94,5%. Esse processo se ajustou a uma cinética de pseudo-primeira ordem, com a isoterma de Langmuir sendo a que melhor descreve o processo adsorptivo. O AMC atingiu concentrações máximas de 287,7 mg/g em monocamada. A adsorção neste sistema foi termodinamicamente classificada como espontânea e endotérmica e os experimentos de regeneração do adsorvente para reutilização em processo de batelada mostraram que o AMCS pode ser reutilizado quando desorvido em NaOH 0,1M, mantendo um bom desempenho ao longo de quatro ciclos (Munagapati et al., 2025)

Os adsorventes para remediação de urânio podem variar entre: minerais de argila e óxidos metálicos, que são adsorventes essenciais pelo controle da migração, transporte e destino do urânio em sistemas naturais (Xie et al., 2019); hidróxidos duplos lamelares que vem sendo muito utilizado devido as suas propriedades de troca iônica (Lv et al., 2025; Xie et al., 2019); sílicas mesoporosas devido às suas características morfológicas como área de superfície e volumes de poros (Li; Liu; Zhao, 2016); polímeros orgânicos como resinas e biopolímeros como quitosana e celulose, que possuem resistência estrutural e propriedades físico-químicas modificáveis (Hokkanen; Bhatnagar; Sillanpää, 2016; Xie et al., 2019); carvão ativado, óxidos de grafeno, nanotubos de carbonos, dos quais possuem cinética de adsorção do urânio rápida e alta capacidade adsorptiva (Mauter; Elimelech, 2008); estruturas porosas como metalorgânicas (MOFs), estruturas orgânicas covalentes (COFs) que possuem porosidade permanente, grandes

áreas de superfície, multifuncionalização fácil e estruturas flexíveis (Şimşek et al., 2022; Xie et al., 2019).

Visando às preocupações ambientais, principalmente as associadas ao uso excessivo de plásticos derivados do petróleo e a utilização de materiais biodegradáveis, um interesse em biopolímeros cresceu nos últimos anos (Melikoglu, 2026). Tal ideia se expande para a aplicação dos biopolímeros na adsorção, pois esses materiais são derivados de subprodutos agrícolas e biomassa diversa, como material lignocelulósico (Melikoglu, 2026).

4.5.1 Material Lignocelulósico

A biomassa lignocelulósica é a mais abundante da Terra, ideal para produção de bioenergia e biomateriais, podendo ser encontrada nas estruturas das paredes celulares das plantas em grande quantidade (Macena et al., 2025; Xiao et al., 2023). É constituída por celulose, lignina e hemicelulose em diferentes percentuais de acordo com a planta (Macena et al., 2025; Xiao et al., 2023).

Resíduos ou subprodutos de biomassa, como materiais lignocelulósicos, são promissores para o tratamento de águas residuárias, pois além de efetuar o tratamento dessas águas ainda é possível realizar o reaproveitamento de resíduos (Macena et al., 2025). Estes resíduos podem ser gerados a partir de atividades agrícolas e agroindustriais, que geram uma grande variedade de subprodutos lignocelulósicos como palhas, cascas, folhas, raízes, polpas, bagaço, dentre outros (Macena et al., 2025; Xiao et al., 2023).

Para alcançar um aproveitamento de alto valor desses materiais lignocelulósicos diante dos crescentes problemas energéticos e ambientais, o intuito é transformá-los em materiais funcionais, sustentáveis e ecológicos para substituição dos não degradáveis e derivados do petróleo (Xiao et al., 2023). Consequentemente a celulose, hemicelulose e lignina vem sendo estudadas pelas suas propriedades estruturais e físico-químicas devido a abundância de grupos funcionais carregados negativamente, como hidroxilas e carboxílicos, contribuindo para a interação com metais ou cátions e sendo eficazes para sua remoção (Macena et al., 2025; Xiao et al., 2023).

4.5.1.1 Celulose

A celulose é o biopolímero mais abundante da natureza, constituindo o principal componente das fibras vegetais conferindo as plantas sua rigidez (Hokkanen; Bhatnagar;

Sillanpää, 2016; Kausar et al., 2023). É um polissacarídeo linear com longas cadeias compostas por unidades de β -D-glucopiranosose unidas através de ligações glicosídicas β -1,4, que unem dois sacarídeos, em que o carbono anomérico (C1) de um monossacarídeo se liga ao carbono 4 (C4) de outro. Em sua estrutura uma unidade repetitiva são os grupos metilol (CH_2OH) e hidroxilas (-OH) (El Mahdaoui et al., 2024; Etale et al., 2023; Hokkanen; Bhatnagar; Sillanpää, 2016; Kausar et al., 2023).

A estrutura da celulose pode ser caracterizada como um polímero semicristalino, que contém fases cristalinas e amorfas devido à ausência de cadeias laterais ou ramificações, permitindo sua existência de forma ordenada (Darmenbayeva et al., 2024). É um polímero que apesar de conter hidroxilas hidrofílicas, não se dissolve em água e solventes comuns devido a presença de fortes ligações de hidrogênio entre as cadeias de celulose adjunto de forças de Van der Waals entre as unidades de glicose, levando a formação de regiões cristalinas (Aldakhil et al., 2018).

A celulose pode ser encontrada em diferentes plantas, microrganismos e animais. Pode ser encontrada ainda em fibras de sementes como a de algodão, fibras de madeiras duras e macias, fibras de líber, linho, cânhamo, bagaço de bambu, em algas e em bactérias como *Acetobacter xylinum* (Aldakhil et al., 2018; Darmenbayeva et al., 2024; Hokkanen; Bhatnagar; Sillanpää, 2016; Klemm et al., 1998).

Os materiais à base de celulose podem ser obtidos e empregados como adsorventes de baixo custo por serem obtidos de biomassas abundantes de grupos hidroxilas na superfície da celulose, possibilitando a adsorção de diferentes poluentes em solução aquosa (Darmenbayeva et al., 2024; Kausar et al., 2023). Em geral, esses materiais podem ser quimicamente modificados para aumentar sua capacidade adsortiva, podendo ocorrer a modificação através da enxertia de monômeros, que envolve o processo de enxertos de cadeias laterais covalentemente ligadas a cadeia principal formando um copolímero ramificado, como grupos imidazol, amidoxima, glicidilmetacrilato (GMA), grupos aminos, dentre outros (Darmenbayeva et al., 2024; Kausar et al., 2023). Estes podem ser enxertados por radiação de alta energia, iniciação fotoquímica, iniciação química (radicais ou iônica); métodos de modificação química direta, por esterificação, halogenação, oxidação, eterificação, tratamento alcalino e salinização (El Mahdaoui et al., 2024; Kausar et al., 2023).

4.5.1.2 Hemicelulose

A hemicelulose é um polissacarídeo da parede celular vegetal, sintetizada por glicosiltransferases nas membranas do complexo de Golgi, sendo o segundo componente mais abundante presente na biomassa lignocelulósica após a celulose, com cadeias principais ligadas por β -(1-4), com configuração equatorial (Scheller; Ulvskov, 2010; Xiang et al., 2022). Ainda pode ser classificada como um heteropolissacarídeo, pois é composta por diferentes monossacarídeos como a D-xilose e L-arabinose, que são pentoses, e D-glicose ou D-glucose, D-galactose, D-manose, que são hexoses e ainda possuem ácido D-glucurônico e ácido D-galacturônico (He; Liu; Zhang, 2024; Manyatshe; Sibali, 2025; Scheller; Ulvskov, 2010; Şimşek; Kaya; Jalbani, 2023; Xiang et al., 2022; Xiao et al., 2023). Com base nas fontes vegetais, composições e estruturas, as hemiceluloses apresentam uma variedade de tipos, incluindo principalmente glucomananas, glucuronoxilanas, arabinoxilanas, heteroxilanas, etc, porém a estrutura detalhada das hemiceluloses e sua abundância variam amplamente entre diferentes espécies e tipos celulares (He; Liu; Zhang, 2024; Manyatshe; Sibali, 2025; Scheller; Ulvskov, 2010; Şimşek; Kaya; Jalbani, 2023; Xiang et al., 2022; Xiao et al., 2023).

A hemicelulose tem atraído cada vez mais atenção devido aos avanços na tecnologia de refino de biomassa que facilitam o seu isolamento (Rao et al., 2023). Como sua estrutura é amorfa, ramificada, tem uma menor estabilidade em relação a celulose, excelente biodegradabilidade, biocompatibilidade e bioatividade, a hemicelulose se torna valiosa para usos variados (Rao et al., 2023). Na adsorção, além de tais propriedades, a hemicelulose possui abundância de grupos hidroxilas e carboxilas ativos e que possuem hidrofiliçidade e agem como ótimos quelantes para cátions, o que faz dessa matriz um possível bioadsorvente (Rao et al., 2023; Xiang et al., 2022; Xiao et al., 2023).

Essa estrutura pode ser utilizada de forma direta, sem modificações, ou após modificações estruturais e químicas (He; Liu; Zhang, 2024). Por se hidrolisarem facilmente em água e possuir fácil modificação química pela presença dos grupos hidroxilas e carboxilas, normalmente a hemicelulose acaba sofrendo processos de enxertia ou combinação com outros compostos químicos ou polímeros com boas capacidades adsorativas para a produção de um novo adsorvente a base de hemicelulose. As principais modificações químicas que a hemicelulose pode sofrer são pelos métodos de esterificação, eterificação, aminação, dimerização, acetilação e fluoração (He; Liu; Zhang, 2024; Rao et al., 2023; Xiang et al., 2022).

4.5.1.3 Lignina

A lignina é uma molécula polifenólica complexa e com estrutura amorfa que é formada pela polimerização desidrogenativa realizada por enzimas dos três tipos primários de álcoois: álcool p-cumarílico (H), álcool coniferílico (G) e álcool sinapílico (S) que servem como blocos de construção para a estrutura da lignina por meio de reações químicas (AlQasas; Johnson, 2025; Ge; Li, 2018; Han; Hong, 2025; Raj et al., 2025; Supanchaiyamat et al., 2019). Esses monômeros, após o processo de polimerização, produzem as unidades estruturais da lignina que são o p-hidroxifenil (originado pelo álcool p-cumarílico, H), guaiacil (originado pelo álcool coniferílico, G) e siringil (originado pelo álcool sinapílico, S) das quais resultam das ligações carbono-carbono e éter, estruturas macromoleculares tridimensionais (AlQasas; Johnson, 2025; Ge; Li, 2018; Han; Hong, 2025; Raj et al., 2025; Supanchaiyamat et al., 2019). Essas subunidades constituem várias subespécies, como carboxila e metoxila, que podem ser utilizadas para modificações químicas adicionais (Raj et al., 2025).

A lignina é uma biomacromolécula amorfa ramificada, sendo um polímero aromático natural que compõe a parede celular vegetal, auxiliando as fibras internas e paredes celulares no transporte de água e nutrientes e ainda ajuda a proteger-las de ataques microbianos (Raj et al., 2025). Além disso, a lignina é um subproduto comum das indústrias de biorrefinarias e resíduo significativo na produção de papel e celulose, tornando-a barata e acessível, porém apenas cerca de 2% da lignina gerada é utilizada tanto na forma inalterada como modificada (Raj et al., 2025).

Por ser barata e acessível, a lignina pode ser usada diretamente para remover poluentes de água (Supanchaiyamat et al., 2019; Xiao et al., 2023). Além disso, características dessa molécula como alta porosidade e a abundância de grupos funcionais ativos como hidroxila fenólica, hidroxila, aldeído, grupos carbonila, a tornam de interesse como material adsorativo, além de que a presença de tais grupos facilitam a modificação química da molécula podendo melhorar suas capacidades adsorativas (Supanchaiyamat et al., 2019; Xiao et al., 2023).

A modificação da lignina é feita para melhorar de forma direcionada a captura de contaminantes de interesse, no intuito de aproveitar ao máximo a combinação de sítios ativos na sua estrutura. As modificações estão entre oxidação, sulfonação, carboxilação, alquilação e aminação, as quais produzem novos materiais funcionais que combinam as propriedades do material da lignina com as propriedades de outros materiais (AlQasas; Johnson, 2025; Supanchaiyamat et al., 2019) Dentre esses, pode-se citar compostos de lignina e grafeno (Chen

et al., 2020; Sun et al., 2021), lignina com nanopartículas magnéticas (Li et al., 2016; Petrie et al., 2021; Zhang et al., 2019), dentre outros (Raj et al., 2025; Supanchaiyamat et al., 2019).

4.5.1.4 *Material lignocelulósico para adsorção de U(VI): teórico e experimental*

Como descrito anteriormente, os materiais lignocelulósicos são compostos de celulose, hemicelulose e lignina. Como o urânio, UO_2^{2+} é um cátion e essas estruturas possuem grupos funcionais ativos que envolvem hidroxilas, carboxilas, hidroxilas fenólicas, dentre outros que podem interagir bem com cátions, as mesmas se tornam materiais com alto potencial de remoção do U(VI) de ambientes aquosos (Abutaleb et al., 2020).

Aldakhil *et al.* estudou o caroço de tâmara lignocelulósico para a biossorção de U(VI), investigando a acidez superficial deste caroço para prever a afinidade entre o biossorvente e o adsorvato em diferentes condições (Aldakhil et al., 2018). Os resultados mostraram que o melhor resultado foi em $\text{pH} = 6$, com uma dosagem de 8g/L de adsorvente e um tempo de contato de 60 minutos. A eficiência de remoção desse material para o U(VI) por esse material vai de acordo com o aumento da dosagem, porém a capacidade de adsorção diminui devido a competição entre os sítios disponíveis. Em relação a modelagem cinética, o estudo indicou que o processo adsorptivo se ajusta ao modelo de pseudo-segunda ordem, com capacidade máxima de adsorção de 11,85mg/g e a caracterização do FTIR mostrou que o U se liga predominantemente por ligação covalente com grupos carboxílicos e hidroxílicos do caroço de tâmara (Aldakhil et al., 2018).

Wang *et al.* estudaram a remoção de urânio de soluções aquosas por palha de trigo (Wang et al., 2012). Os resultados mostraram que a maior taxa de adsorção foi obtida quando a palha de trigo foi tratada com NaOH 1,0 mol/L durante 24h em contato, em comparação sem o tratamento e com outros compostos estudados como ácido nítrico (HNO_3), ácido cítrico, etanol. A palha de trigo previamente tratada com NaOH foi utilizada para os mecanismos de adsorção, em uma solução com $\text{pH} = 3,0$ e apresentou uma taxa de 84,45%, uma vez que o NaOH pode dissolver SiO_2 e ésteres não aromáticos presentes na superfície da palha, deixando a celulose, hemicelulose e lignina expostas. Logo, nessa condição de $\text{pH} = 3,0$, esse material atinge uma capacidade de saturação de 1,20mg/g e uma eficiência de remoção de cerca de 96%, com o equilíbrio atingido em 120 minutos e dosagem do adsorvente ideal de 8 g/L. O modelo cinético de adsorção se ajustou em pseudo-segunda ordem e na isoterma de Freundlich sugerindo um processo de sorção em multicamada e os demais resultados mostraram que esse mecanismo foi espontâneo e endotérmico (Wang et al., 2012).

Behera *et al.*, analisaram a remoção do urânio de solução aquosa a partir da celulose extraída da folha da planta *Musa paradisiaca*, uma bananeira (Behera; Arti; Mehra, 2025). Esse estudo contou com a análise da eficiência de remoção em dose diferentes de celulose, variando de 10mg a 50mg e concentrações de urânio de 10 $\mu\text{g/L}$ a 100 $\mu\text{g/L}$ e pH variando de 2 a 7 com tempo de contato entre 15 e 60 minutos. Os resultados indicaram uma eficiência máxima de cerca de 97,69% em condições de pH = 4,5, concentração do urânio de 55 $\mu\text{g/L}$, 10 mg do adsorvente e 15 minutos de contato, mostrando que a celulose extraída da bananeira é eficiente para remoção (Behera; Arti; Mehra, 2025).

Um outro estudo utilizando material lignocelulósico foi realizado por Abutaleb *et al.* avaliando o uso da fibra de linho para remoção de íons de urânio (Abutaleb et al., 2020). Os principais componentes da fibra de linho são a celulose (85,3%), hemicelulose (8,3%) e lignina (3,5%). A fibra de linho apresentou uma grande área superficial que resultou em bons sítios adsorptivos, uma capacidade de adsorção de 40,9 mg/g em pH = 4, 323 K e 1,2 g de dose de adsorvente com o processo podendo variar entre exotérmico a partir de 323 K e endotérmico abaixo disso. Os estudos cinéticos mostraram que é um mecanismo de pseudo-segunda ordem e o modelo de adsorção que melhor descreveu o processo foi o de Langmuir. Além disso, os autores discutiram o processo de regeneração das fibras, ue foi feito pela escolha do HNO_3 como eluente, em que o íon contendo urânio foi recuperado por uma solução de amônio (NH_4OH) até pH = 8 formando o diurinato de amônio que foi filtrado e aquecido a 1073 K para obtenção de um concentrado de urânio (*yellowcake*). Na regeneração do urânio com um teor de pureza de 98,33%, apesar dos resultados mostrarem que houve uma redução da adsorção de acordo os ciclos de regeneração saindo de 93,50% de adsorção do primeiro para 78,23% após 5 ciclos, a fibra de linho manteve um desempenho aceitável (Abutaleb et al., 2020).

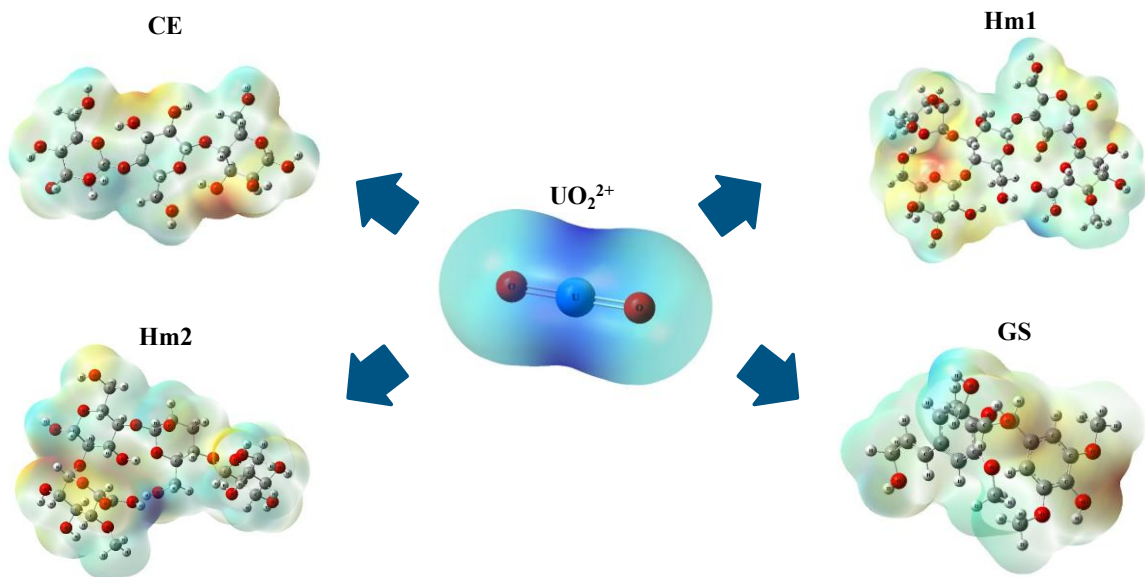
Além de exemplos de estudos experimentais, é possível analisar os estudos de remoção do urânio por meios adsorptivos utilizando a química teórica computacional, que fornece informações em nível molecular de geometrias otimizadas, sítios de adsorção, densidade de carga, estabilidade energética relativa dos sistemas por meio de análise de modelagem molecular e Teoria do Funcional da Densidade (DFT) (Bihain; Pereira; Pereira, 2025; Xie et al., 2019). Na literatura são encontrados trabalhos teóricos envolvendo a adsorção do urânio em diferentes materiais (Li et al., 2023; Liu et al., 2025; Meng et al., 2024; Şimşek et al., 2022), porém, até onde foi analisado e estudado, não são encontrados artigos que descrevam teoricamente os mecanismos adsorptivos do urânio com celulose, lignina e hemicelulose sem modificação.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Mapa de Potencial Eletrostático

Após a otimização das matrizes, foram analisados os possíveis sítios em que o UO_2^{2+} poderia interagir com as matrizes estudadas pelo mapa de potencial eletrostático (*Molecular Electrostatic Potential* - MEP). Esta análise permite visualizar regiões de cargas variáveis em uma molécula, em que a região vermelha indica maior densidade eletrônica e a azul menor densidade eletrônica. A [Figura 4](#) mostra os MEPs da celulose (CE), Hemicelulose (Hm1 e Hm2), lignina (GS) e UO_2^{2+} .

Figura 4. Mapas de Potencial Eletrostático das matrizes de celulose (CE), hemicelulose (Hm1 e Hm2), lignina (GS) e íon uranila (UO_2^{2+}).



Autor, 2026.

Pela [Figura 4](#), o íon uranila, que é um cátion com carga 2+, tem sua nuvem eletrostática positiva, logo terá preferência de interagir com regiões mais eletronegativas das matrizes, pois para a celulose (CE) essa região eletronegativa se encontra nos os oxigênios das hidroxilas (Reis; Ribeiro; Pereira, 2020); para a lignina contendo a unidade monomérica de coniferil (G) ligada a sinapil (S) (GS) é visto que o provável sítio de interação está no anel aromático do monômero S e átomos de oxigênio próximos a este (Santos et al., 2022); para hemicelulose com a substituição com arabinose (Hm1) e sem arabinose (Hm2) ambas tendem a atrair adsorvatos

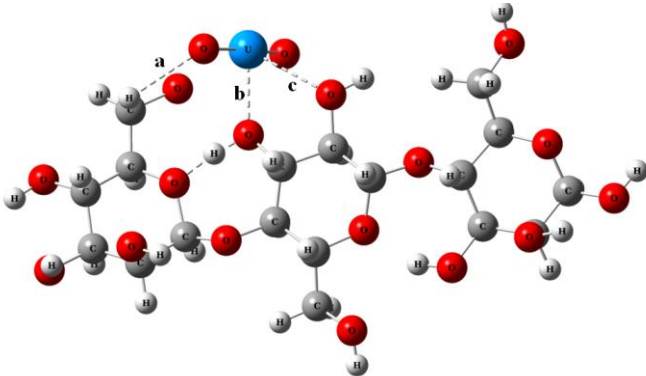
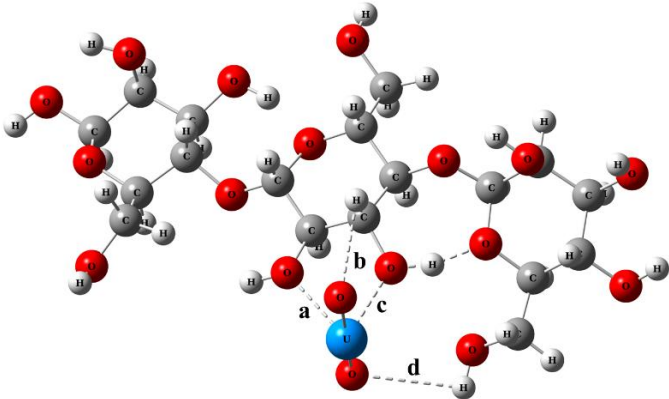
positivos para as regiões onde há a presença de hidroxilas, sendo a região mais negativa da molécula (Gomes et al., 2024).

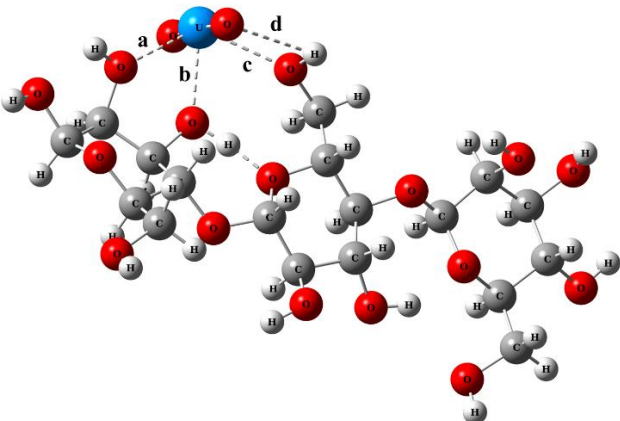
A partir dos resultados do MEPs pode-se simular as interações do UO_2^{2+} com as matrizes e analisar os parâmetros estruturais e energias de interação, energia de Gibbs e Entalpia.

5.2 Parâmetros Estruturais: Distâncias de Interação

As distâncias de interações são um dos principais parâmetros estruturais em mecanismos de interações químicas, uma vez que elas se correlacionam com ordens de ligação e energias de dissociação de ligação (Lobato et al., 2021; Pauling, 1960). Pelas ligações químicas, quanto menor o comprimento de ligação, maior a probabilidade de uma forte atração entre os átomos dos sistemas. Por isso, foram analisados os parâmetros estruturais para distâncias de até 3.000 Å, região esta que possui estabilidade de ligação (Lobato et al., 2021). Os resultados estão apresentados na [Figura 5](#) para celulose, [Figura 6](#) para hemicelulose e [Figura 7](#) para lignina.

Figura 5. Comprimento de ligação do UO_2^{2+} em relação as matrizes de celulose.

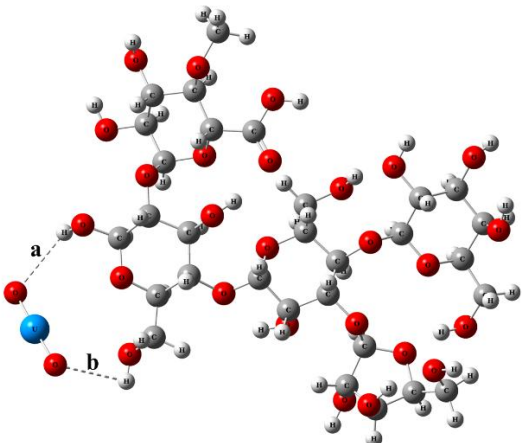
a) CE- UO_2^{2+} (1)	Comprimento de ligação (Å)
	<hr/> a) 2,59 b) 2,30 c) 2,71
b) CE- UO_2^{2+} (2)	Comprimento de ligação (Å)
	<hr/> a) 2,49 b) 2,97 c) 2,34 d) 2,83

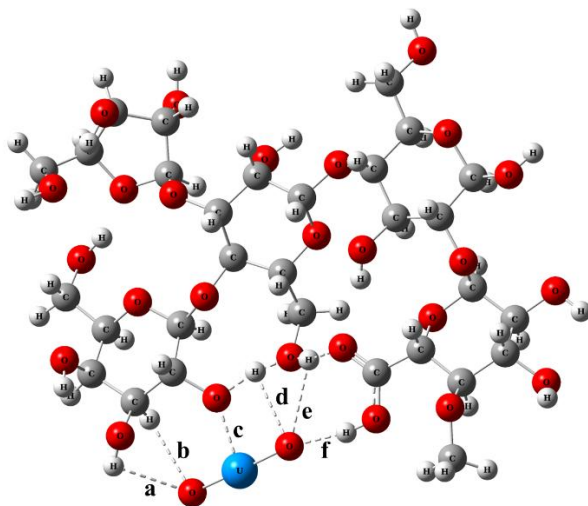
c) CE-UO ₂ ²⁺ (3)	Comprimento de ligação (Å)
	a) 2,42
	b) 2,36
	c) 2,50
	d) 2,59

Autor, 2026.

Pela [Figura 5](#), é possível analisar que o oxigênio do UO₂²⁺ tenderá a interagir com hidrogênio presente nas hidroxilas da celulose (interação O-H) com comprimentos de ligação que variam entre 2,59 Å a 2,97Å, o que corresponde a valores dentro da faixa de ligação de hidrogênio. A interação do U com os oxigênios da matriz (interação U-O), possui comprimentos de ligações entre 2,30Å a 2,71Å.

Figura 6. Comprimento de ligação do UO₂²⁺ em relação as matrizes de hemicelulose (Hm1 e Hm2).

a) Hm1-UO ₂ ²⁺ (1)	Comprimento de ligação (Å)
	a) 2,84
	b) 2,92

b) Hm1-UO₂²⁺ (2)**Comprimento de ligação
(Å)**

a) 2,44

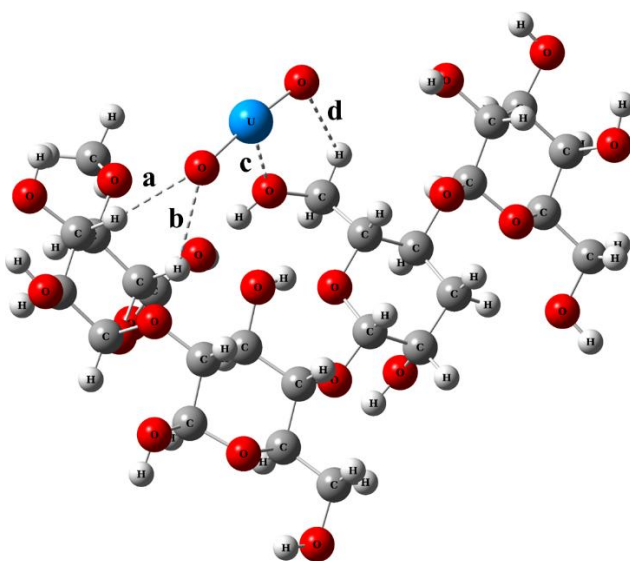
b) 2,64

c) 2,22

d) 2,66

e) 2,57

f) 1,83

c) Hm2-UO₂²⁺ (1)**Comprimento de ligação
(Å)**

a) 2,42

b) 2,75

c) 2,34

d) 2,55

d) Hm2-UO ₂ ²⁺ (2)	Comprimento de ligação (Å)
	a) 2,39 b) 2,88 c) 2,45
e) Hm2-UO ₂ ²⁺ (3)	Comprimento de ligação (Å)
	a) 2,57 b) 2,88 c) 2,49 d) 2,69 e) 2,44 f) 2,42

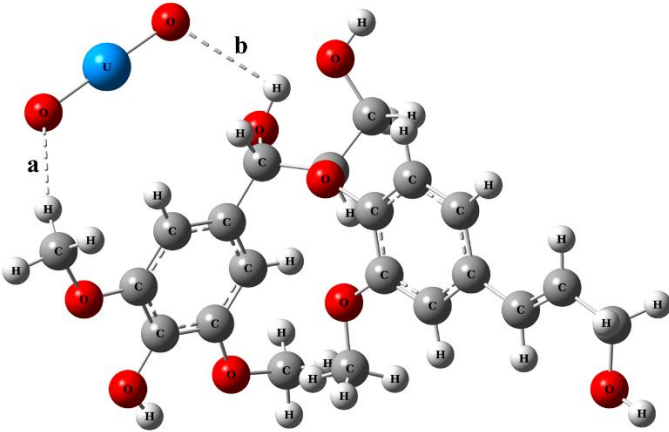
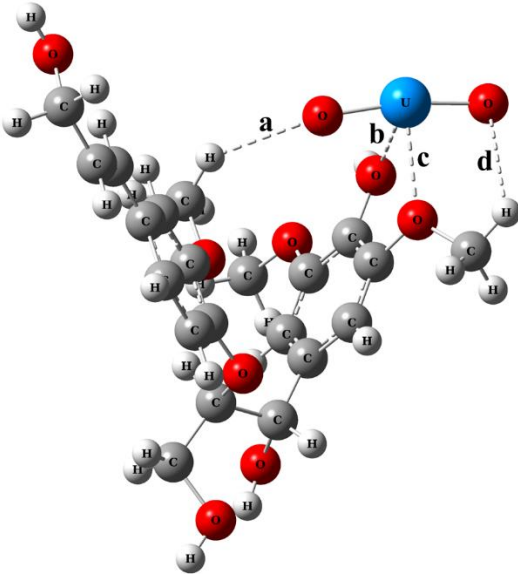
Autor, 2026.

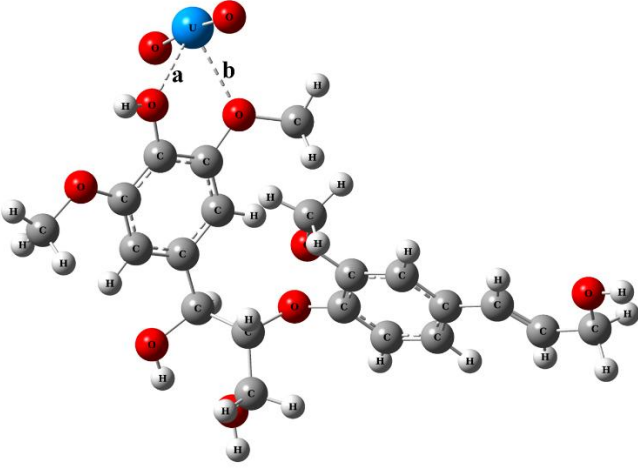
Para o complexo Hm1-UO₂²⁺⁽¹⁾, tem-se que o UO₂²⁺ tenderá a interagir principalmente por ligações de hidrogênio com valores de 2,84 Å e 2,92 Å. Nenhuma interação abaixo de 3,00 Å do urânio com a matriz foi identificada para o complexo Hm1-UO₂²⁺⁽¹⁾. No complexo Hm1-UO₂²⁺⁽²⁾, foi observado apenas uma interação U-O com comprimento de ligação de 2,22. Para as interações O-H, os valores de comprimentos variaram de 1,83 Å a 2,66 Å

Para o complexo Hm2-UO₂²⁺⁽¹⁾ tem-se a predominância de interações do UO₂²⁺ com os hidrogênios tendo os comprimentos variando de 2,42 Å a 2,75 Å e uma única interação U-O

analisada com valor de 2,34 Å. No complexo Hm2- $\text{UO}_2^{2+(2)}$, as interações U-O observadas tiveram valores de comprimento de ligação de 2,39 Å e 2,88 Å; para a única interação O-H analisada, o comprimento de ligação foi de 2,45 Å. Para o complexo Hm2- $\text{UO}_2^{2+(3)}$ também houve uma predominância de interações O-H que variaram de 2,42 Å a 2,88 Å e para interações U-O, foram analisadas duas interações com valores de 2,49 Å e 2,69 Å.

Figura 7. Comprimento de ligação do UO_2^{2+} em relação as matrizes de Lignina (GS).

a) GS- $\text{UO}_2^{2+(1)}$	Comprimento de ligação (Å)
	a) 2,59 b) 2,71
b) GS- $\text{UO}_2^{2+(2)}$	Comprimento de ligação (Å)
	a) 2,46 b) 2,47 c) 2,45 d) 2,97

c) GS-UO ₂ ²⁺ (³)	Comprimento de ligação (Å)
	<p>a) 2,43</p> <p>b) 2,47</p>

Autor, 2026.

Na análise de interação do UO₂²⁺ com a lignina, foram observadas para o complexo GS-UO₂²⁺⁽¹⁾ apenas interações O-H com os comprimentos de ligação variando de 2,59 Å e 2,71 Å, não sendo encontrado nenhuma interação abaixo de 3,00 Å do urânio com a matriz. No complexo GS-UO₂²⁺⁽²⁾, os comprimentos das ligações O-H observados foram de 2,46 Å e 2,97 Å, enquanto as distâncias U-O analisadas corresponderam a 2,45 Å e 2,47 Å. No complexo GS-UO₂²⁺⁽³⁾, não foram observadas interações entre o oxigênio do UO₂²⁺ e hidrogênio da lignina com distâncias menores que 3,00 Å. As ligações U-O neste complexo apresentaram comprimentos de 2,43 Å e 2,47 Å.

5.3 Energias de Interação, Variação de Entalpia e Variação da Energia de Gibbs

Após as análises dos parâmetros estruturais, foram analisadas a energia de interação (ΔE_{Bind}), variação de entalpia ($\Delta_r H$) e a variação da energia de Gibbs ($\Delta_r G$) a 298K, vistos na [Tabela 1](#) a fim de verificar a magnitude das interações do UO₂²⁺ com as matrizes nestes sítios especificados.

Tabela 1. Energia de interação (ΔE_{Bind}), Entalpia ($\Delta_r H$) e Energia de Gibbs ($\Delta_r G$) a 298K para os complexos estudados.

Complexos	Interação	ΔE_{Bind}	$\Delta_r H$	$\Delta_r G$
		kcal mol ⁻¹		
CE-UO ₂ ²⁺	1	-38,96	-40,28	-23,83
	2	-32,37	-33,11	-18,72
	3	-41,22	-42,25	-27,86
Hm1- UO ₂ ²⁺	1	-3,24	-3,45	8,61
	2	-29,27	-30,31	-14,12
Hm2- UO ₂ ²⁺	1	-25,22	-25,80	-11,22
	2	-20,72	-21,78	-5,03
	3	-16,77	-17,78	-1,21
GS- UO ₂ ²⁺	1	-6,15	-6,40	6,39
	2	-22,29	-22,62	-9,40
	3	-22,28	-22,97	-8,85

Autor, 2026.

A partir dos resultados observados na [Tabela 1](#), todas as matrizes obtiveram valores de $\Delta E_{\text{bind}} < 0$, ou seja, todas as matrizes irão interagir com o adsorvato, em uma ordem de interação do UO₂²⁺ reagindo preferencialmente com CE > Hm2 > GS > Hm1, e todas essas interações são exotérmicas ($\Delta_r H < 0$). Em relação a espontaneidade dessas interações, é visto que para as interações 1 das matrizes Hm1 e GS não há espontaneidade, pois os valores obtidos foram de $\Delta_r G = 8,61 \text{ kcal mol}^{-1}$ e $\Delta_r G = 6,39 \text{ kcal mol}^{-1}$, respectivamente. Portanto, para estes sistemas/interações será necessário um acréscimo de energia externa para que essa reação ocorra de forma efetiva. As demais interações foram espontâneas mostrando que os adsorventes podem remover o contaminante UO₂²⁺.

Vale ressaltar que Hm1-UO₂²⁺ (1) e GS-UO₂²⁺ (3) que não mostraram espontaneidade na reação e menor capacidade adsortiva foram as configurações que não demonstraram ligações com o átomo de urânio.

5.4 Teoria Quântica de Átomos em Moléculas

Para caracterizar as interações ou ligações dos sistemas estudados, os seguintes critérios são utilizados: a) quanto maior o valor de $\rho_{(r)}$ no BCP, caracteriza maior intensidade da interação; b) $\nabla^2 \rho_{(r)} > 0$ caracteriza ligações não covalentes e $\nabla^2 \rho_{(r)} < 0$ caracteriza ligações

covalentes; c) $\nabla^2\rho(r) > 0$ e $H(r) < 0$ a interação é parcialmente covalente; d) $\nabla^2\rho(r) > 0$ e $H(r) > 0$ é classificada como eletrostática (Asogwa et al., 2024; Bader, 1990; Grabowski, 2013). Para as E_{HB} quanto maior o valor de E_{HB} mais forte é a ligação de hidrogênio (Pimentel et al., 2023). Dessa forma, as [Tabelas 2, 3 e 4](#) mostram os resultados de QTAIM para interação do UO_2^{2+} com a matriz de celulose, hemicelulose (Hm1 e Hm2) e lignina, respectivamente.

Tabela 2. Parâmetros topológicos calculados em unidades atômicas (a.u) nos BCPs das interações para matriz de celulose.

Complexos	BCP	$\rho(r)$	$\nabla^2\rho(r)$	$V(r)$	$G(r)$	$H(r)$	E_{HB}	Interação
CE- UO_2^{2+} (1)	H14 - O68	0,007367	0,033504	-0,004366	0,006371	0,002005	0,002183	Eletrostática
	O16 - U67	0,051729	0,203778	-0,054099	0,052522	-0,001577		Parcialmente Covalente
	O31 - U67	0,080806	0,280386	-0,097179	0,083637	-0,013542		Parcialmente Covalente
	O33 - U67	0,032005	0,118539	-0,026852	0,028243	0,001391		Eletrostática
CE- UO_2^{2+} (2)	O33 - U67	0,051858	0,196164	-0,052576	0,050808	-0,001768		Parcialmente Covalente
	O31 - U67	0,073730	0,259868	-0,085074	0,075021	-0,010053		Parcialmente Covalente
CE- UO_2^{2+} (3)	O40 - U67	0,049482	0,195414	-0,051232	0,050043	-0,001189		Parcialmente Covalente
	O55 - U67	0,070040	0,250535	-0,079243	0,070938	-0,008305		Parcialmente Covalente
	O53 - U67	0,056952	0,220350	-0,061163	0,058125	-0,003038		Parcialmente Covalente

Autor, 2026.

Para as interações no complexo CE- UO_2^{2+} (1), um maior o valor de $\rho(r)$ é encontrado no BCP O31-U67, seguido do BCP O16-U67, das quais são as duas interações que se caracterizaram como parcialmente covalente ($\nabla^2\rho(r) > 0$ e $H(r) < 0$), mostrando maior intensidade de interação nesses pontos. As demais interações apresentadas nos complexos, foram caracterizadas como eletrostáticas por obter valores de $\nabla^2\rho(r) > 0$ e $H(r) > 0$. Para a única ligação de hidrogênio apresentada dentre os três complexos, pode-se classificá-la como uma E_{HB} fraca devido ao valor muito baixo de 0,00218 a.u.

Tabela 3. Parâmetros topológicos calculados em unidades atômicas (a.u) nos BCPs das interações para matriz de hemicelulose (Hm1 e Hm2).

Complexos	BCP	$\rho(r)$	$\nabla^2\rho(r)$	$V(r)$	$G(r)$	$H(r)$	E_{HB}	Interação
Hm1-UO_2^{2+} (1)	H53 - O108	0,003190	0,012895	-0,001512	0,002368	0,000856	0,000756	Eletrostática
	O54 - U107	0,003263	0,013888	-0,001810	0,002641	0,000831		Eletrostática
Hm1-UO_2^{2+} (2)	O11 - U107	0,097523	0,324583	-0,129089	0,105118	-0,023971		Parcialmente Covalente
	H95 - O109	0,029742	0,113375	-0,026442	0,027393	0,000951	0,013221	Eletrostática
Hm2-UO_2^{2+} (1)	O2 - H71	0,008658	0,040299	-0,005074	0,007574	0,002500	0,002537	Eletrostática
	O2 - H69	0,004430	0,019343	-0,002229	0,003532	0,001303	0,001115	Eletrostática
	U1 - O36	0,073690	0,273277	-0,087803	0,078061	-0,009742		Parcialmente Covalente
Hm2-UO_2^{2+} (2)	O14 - U89	0,022240	0,075317	-0,016455	0,017642	0,001187		Eletrostática
	H27 - O91	0,009063	0,037464	-0,005085	0,007225	0,002140	0,002543	Eletrostática
	O18 - U89	0,065306	0,237173	-0,072161	0,065727	-0,006434		Parcialmente Covalente
Hm2-UO_2^{2+} (3)	H31 - O91	0,007426	0,031353	-0,003827	0,005832	0,002005	0,001914	Eletrostática
	O47 - U89	0,051627	0,192815	-0,052417	0,050310	-0,002107		Parcialmente Covalente
	O35 - U89	0,032696	0,123997	-0,028525	0,029762	0,001237		Eletrostática
	H41 - O90	0,008922	0,040178	-0,005264	0,007654	0,002390		Eletrostática
	H42 - O90	0,009967	0,043297	-0,005889	0,008357	0,002468	0,002945	Eletrostática

Autor, 2026.

Para Hm1, foi identificado apenas uma interação parcialmente covalente dada pelo BCP O11-U107, identificado no complexo Hm1- UO_2^{2+} (1), que também possui o maior valor de $\rho(r)$. As demais interações nos dois complexos de Hm1 foram eletrostáticas. A ligação de hidrogênio caracterizada, foi fraca pelo valor de $E_{HB} = 0,000756$ au.

Nos complexos de Hm2, foi caracterizado majoritariamente interações eletrostáticas ($\nabla^2\rho(r) > 0$ e $H(r) > 0$) e as ligações de hidrogênio caracterizadas são definidas como ligações fracas (E_{HB} muito baixos), exceto para os BCPs: U1-O36 localizado no complexo Hm2- UO_2^{2+} (1); O18 - U89 localizado no complexo Hm2- UO_2^{2+} (2); e O47-U89 localizado no complexo Hm2- UO_2^{2+} (3) dos quais apresentaram interações parcialmente covalente ($\nabla^2\rho(r) > 0$ e $H(r) < 0$) e valores de $\rho(r)$ 0,073690 a.u, 0,065306 a.u. e 0,051627a.u respectivamente.

Tabela 4. Parâmetros topológicos calculados em unidades atômicas (a.u) nos BCPs das interações para matriz de lignina.

Complexos	BCP	$\rho(r)$	$\nabla^2\rho(r)$	$V(r)$	$G(r)$	$H(r)$	E_{HB}	Interação
GS-UO ₂ ²⁺ (1)	H53 - O58	0,006015	0,024618	-0,003059	0,004607	0,001548	0,001530	Eletrostática
	H8 - O58	0,002498	0,008441	-0,000915	0,001513	0,000598	0,000458	Eletrostática
GS-UO ₂ ²⁺ (2)	H36 - O57	0,008024	0,036699	-0,004527	0,006851	0,002324	0,002264	Eletrostática
	O9 - U56	0,057379	0,219085	-0,061446	0,058109	-0,003337		Parcialmente
								Covalente
O10 - U56	0,052553	0,208060	-0,055225	0,053620	-0,001605		Parcialmente	
GS-UO ₂ ²⁺ (3)	O9 - U56	0,05789	0,229213	-0,06348	0,060392	-0,003088		Covalente
								Parcialmente
	O10 - U56	0,054599	0,207212	-0,05697	0,054387	-0,002584		Covalente

Autor, 2026.

Para os complexos de lignina, todas as interações do urânio com a matriz nas três posições diferentes, são ligações parcialmente covalente devido aos valores de $\nabla^2\rho(r) > 0$ e $H(r) < 0$. As interações O-H foram identificadas como eletrostáticas por terem valores $\nabla^2\rho(r) > 0$ e $H(r) > 0$ e devido a valores de E_{HB} , muito baixos, as ligações de hidrogênio foram caracterizadas como fracas.

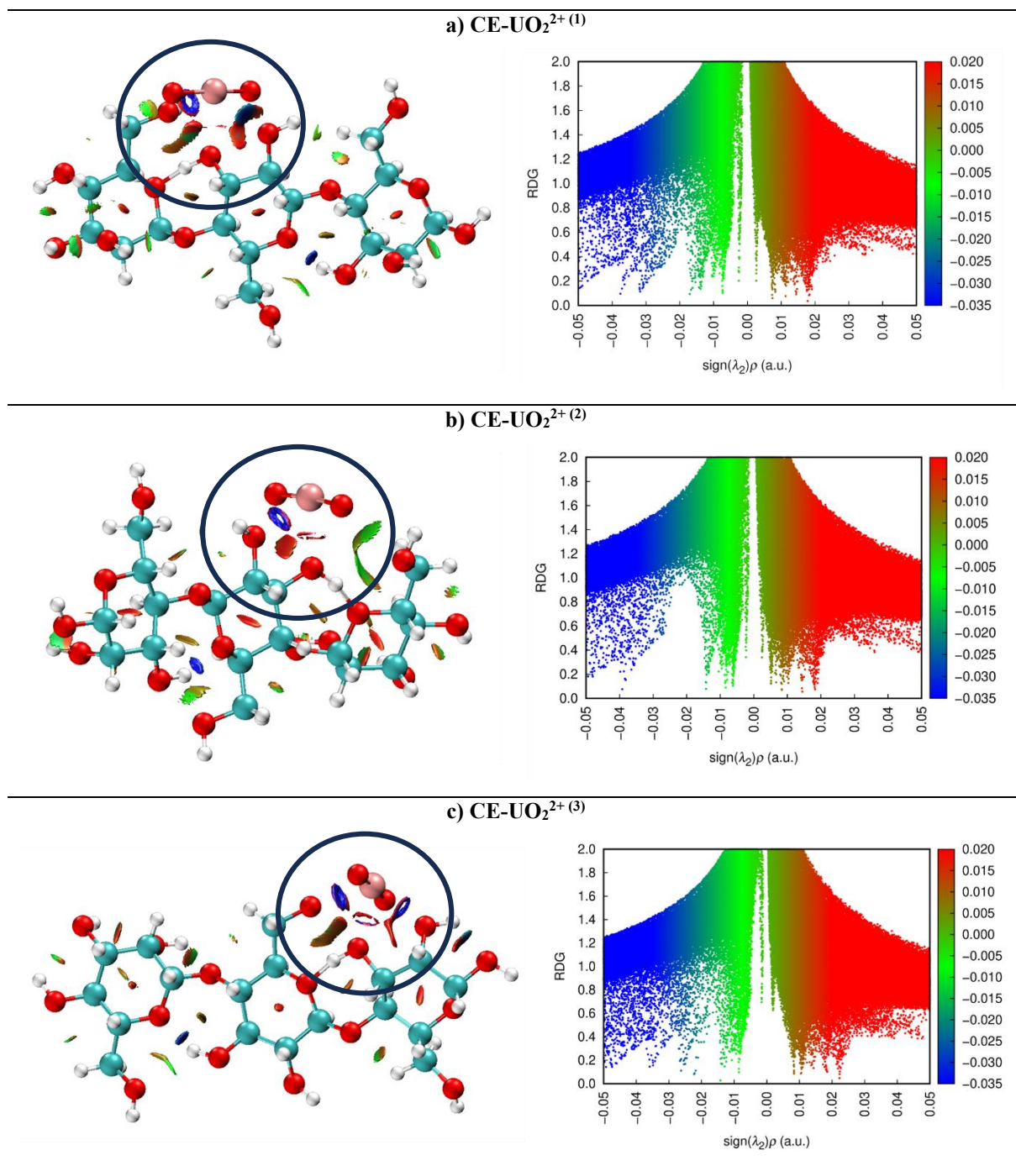
Dessa forma, analisando os resultados dos diferentes complexos para o QTAIM, pode-se observar que as matrizes de lignina contendo os grupos coniferil e sinapil e celulose, irão interagir com mais intensidade com o U devido maiores caracterizações de interações parcialmente covalente e maiores valores de $\rho(r)$ em comparação a hemicelulose, da qual apresentou majoritariamente interações eletrostáticas, mostrando a eficiência de interação das matrizes em remover o UO₂²⁺ via adsorção.

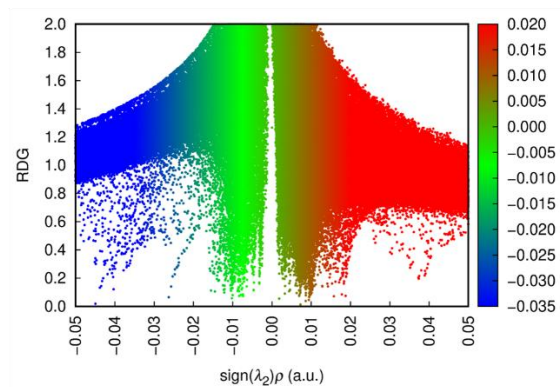
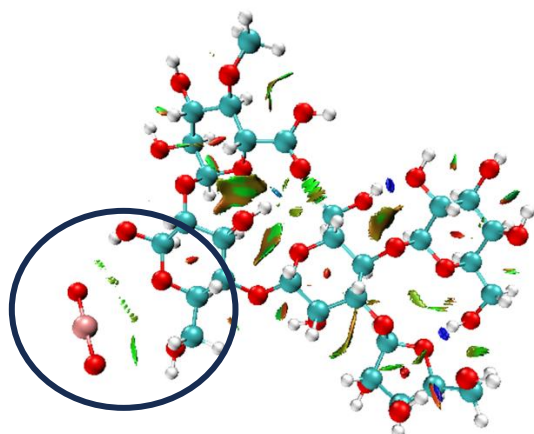
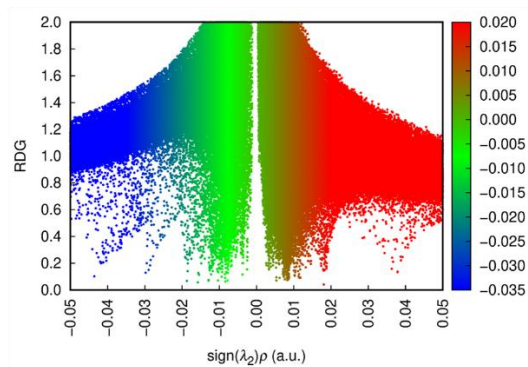
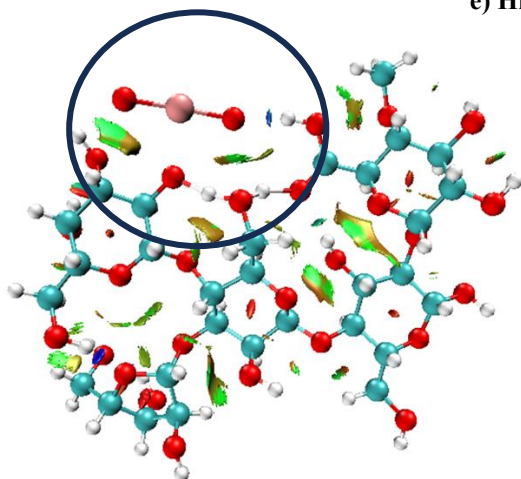
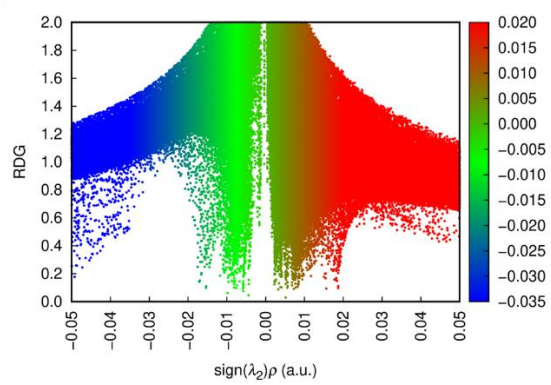
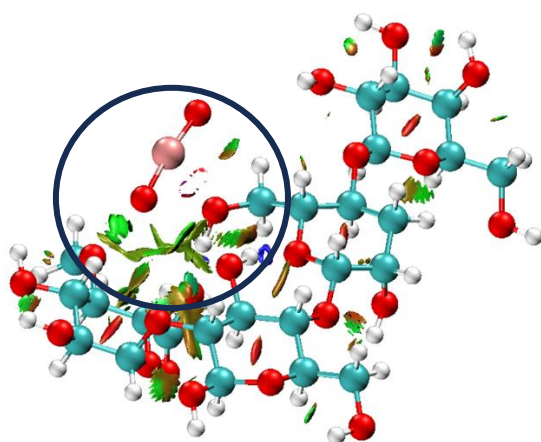
5.5 Interação Não-Covalente (NCI)

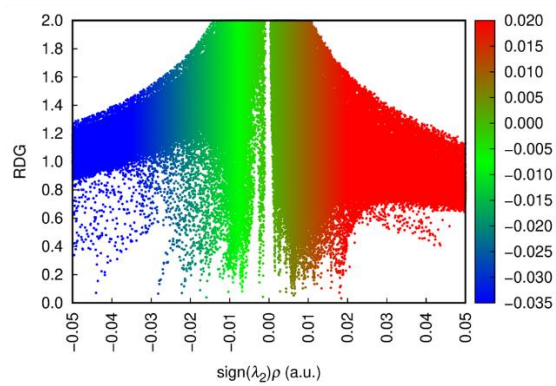
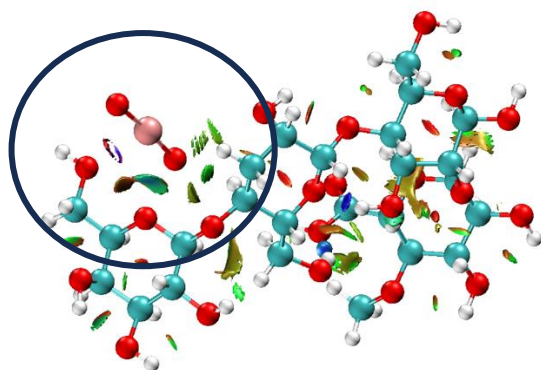
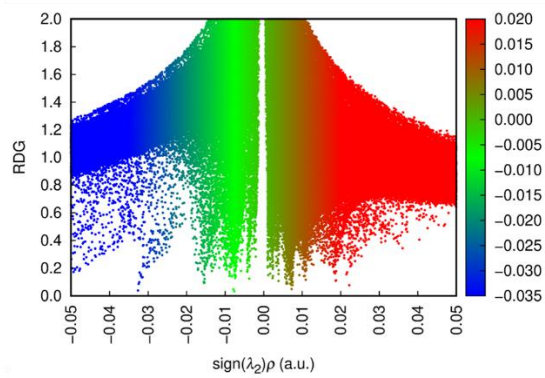
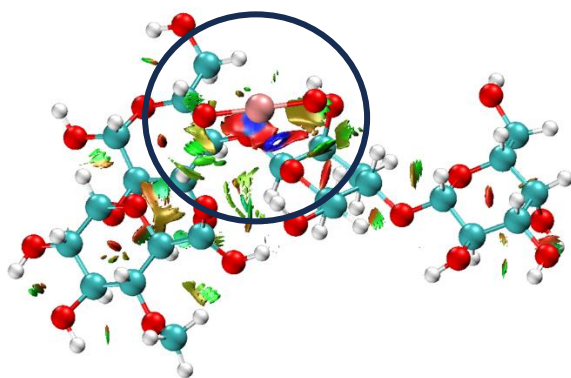
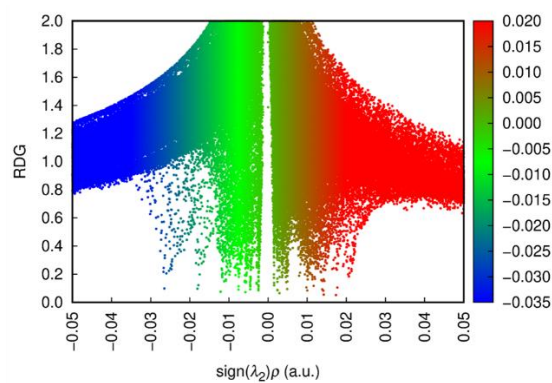
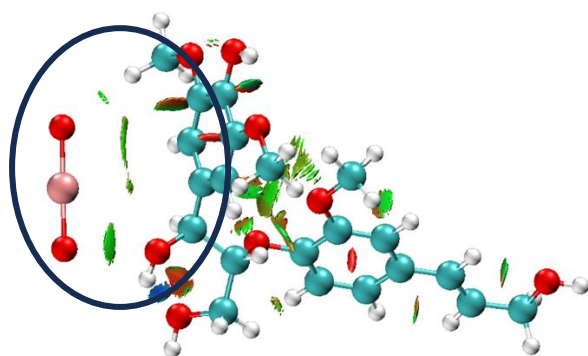
A análise de Interação Não-Covalente (*Non Covalent Interaction*, NCI) vem como uma análise de interações fracas como ligações de hidrogênio (HB), van der Waals, empilhamento π - π e σ -buraco e metal-ligante (Hajji et al., 2021; Johnson et al., 2010). A natureza dessas interações fracas intermoleculares dos complexos de urânio foi investigada e pode ser vista pelo gráfico RDG em função da densidade eletrônica pelo sinal do segundo autovalor da matriz

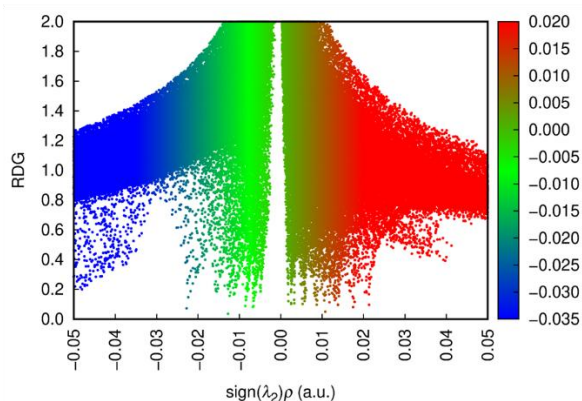
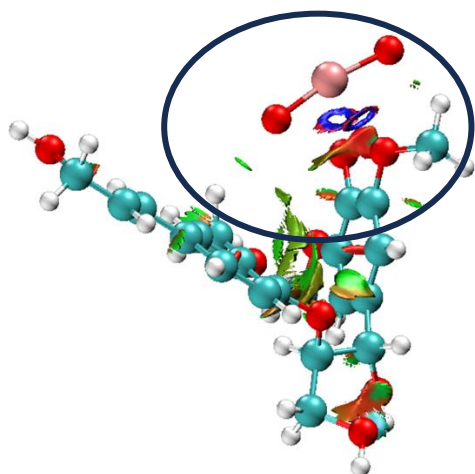
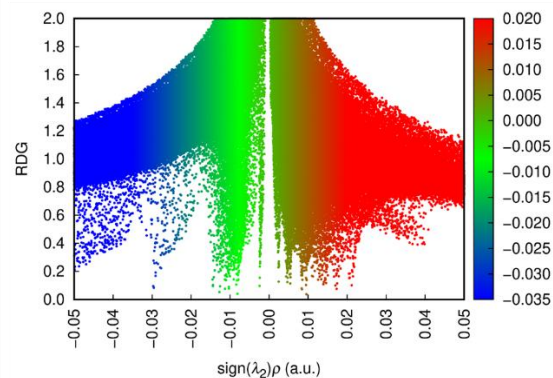
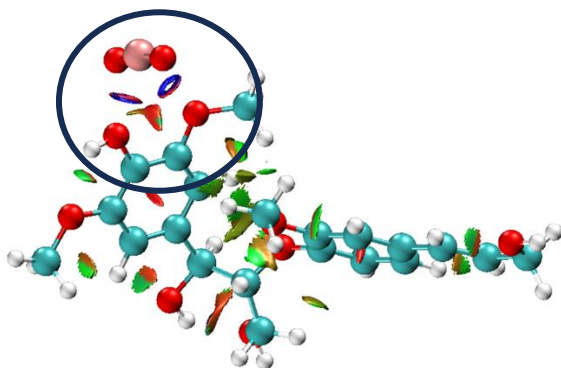
Hessiana ($\text{sign}\lambda_2\rho$) e os gráficos de isosuperfícies, permitindo distinguir as interações fortes ou ligação de hidrogênio que é representada pela cor azul e no gráfico $\text{sign}\lambda_2\rho < 0$; a cor verde, interações intermediárias ou de van der Waals e no gráfico $\text{sign}\lambda_2\rho \sim 0$; e a vermelha para repulsão $\text{sign}\lambda_2\rho > 0$, que é visto na [Figura 8](#).

Figura 8. Gráficos de isosuperfícies (a esquerda) e RDG (a direita) para interação do UO_2^{2+} com as matrizes de celulose (CE), hemicelulose (Hm1 e Hm2) e lignina (SG).



d) Hm1-UO₂²⁺ (1)**e) Hm1-UO₂²⁺ (2)****f) Hm2-UO₂²⁺ (1)**

g) Hm2-UO₂²⁺ (2)**h) Hm2-UO₂²⁺ (3)****i) GS-UO₂²⁺ (1)**

j) GS-UO₂²⁺ (2)k) GS-UO₂²⁺ (3)

Autor, 2026.

Pelo gráfico RDG e de isosuperfície mostram interações inter- e intramoleculares não covalentes dos complexos estudado. Portanto, as regiões negativas $\text{sign}\lambda_2\rho$, dadas pelos picos localizados em valores baixos de RDG, podem corresponder a interações coordenadas e atrativas entre átomos de urânio e matrizes de oxigênio, o que também justifica o menor comprimento de ligação entre o átomo de urânio e a matriz de celulose e lignina; e, entre os átomos da própria estrutura matricial. Estes resultados podem ser comprovados pelos gráficos de isosuperfícies dos complexos, localizadas a esquerda da figura R, sendo possível observar isosuperfícies formadas entre os átomos do U do UO₂²⁺ e O das matrizes na coloração azulada, indicando interações fortes.

A região central dos gráficos de RDG, próximo a $\text{sign}\lambda_2\rho \sim 0$, mostra uma maior dispersão de forças de van der Waals, que é indicada pela cor verde nos gráficos de isosuperfícies, sobre os complexos sugerindo uma estabilidade relacionada a coordenação eficiente do urânio pelas matrizes, estabilizando esse complexo.

As regiões localizadas em $\text{sign}\lambda_2\rho > 0$ correspondem as interações repulsivas, indicados em vermelho nos gráficos de isosuperfície. A repulsão é observada principalmente entre os anéis carbônicos das matrizes e entre os oxigênios, o que é esperado pelo impedimento estérico dos anéis.

Assim, os resultados do NCI mostram que os complexos interagem por meio de interações U–O de forma fortemente atraente, como indicado pelas regiões azuis entre esses átomos. O complexo é estabilizado pela dispersão das forças atrativas de van der Waals. Esses resultados indicam que a adsorção ocorreu dentro dos sistemas estudados.

6 CONCLUSÃO

O urânio (U) é a principal matéria-prima da energia nuclear e uma alternativa às fontes renováveis. Na natureza, sua forma mais estável e solúvel é o urânio hexavalente U(VI) (UO_2^{2+}), presente em repositórios de rejeitos radioativos, podendo contaminar recursos hídricos e causar danos ambientais e aos humanos, justificando a necessidade da sua remoção.

Neste contexto, os resultados mostraram que o UO_2^{2+} apresentou a maior energia de interação com a matriz CE, seguido pelo Hm1, Hm2, e por fim o GS que apresentou interações mais fracas. Os parâmetros estruturais mostraram comprimentos de ligações menores de 3,00Å entre o adsorvato e adsorvente.

Para as energias de reação, os resultados mostraram espontaneidade ($\Delta_r G < 0$) para todas as matrizes com exceção para Hm1- $\text{UO}_2^{2+(1)}$ e GS- $\text{UO}_2^{2+(1)}$. Nos parâmetros topológicos, obtidos pela QTAIM, todos os tipos de interações foram caracterizados como não covalentes, com as interações do urânio com os oxigênios das matrizes apresentando interações parcialmente covalentes e aquelas dos átomos de oxigênio do UO_2^{2+} com os átomos de hidrogênio das matrizes resultando em interações eletrostáticas.

As análises de NCI mostraram, em complemento do QTAIM, que as interações U-O majoritariamente apresentaram valores de $\text{sign}\lambda_2\rho < 0$ e coloração azulada indicando interações fortes e as interações O-H apresentaram valores de $\text{sign}\lambda_2\rho \sim 0$ e coloração esverdeada indicando interações van der Waals. Assim, é possível concluir que a celulose não modificada, hemicelulose com e sem o grupo arabinose e a lignina com grupo coniferil e sinapil, são boas matrizes adsorventes para a remoção de urânio na forma de UO_2^{2+} de recursos hídricos.

REFERÊNCIAS

- ABOLLI, Samaneh *et al.* Understanding uranium distribution: A systematic review and meta-analysis in the context of drinking water resources. **Results in Engineering**, v. 22, p. 102152, 1 jun. 2024.
- ABUTALEB, A. *et al.* Removal and recovery of U(VI) from aqueous effluents by flax fiber: Adsorption, desorption and batch adsorber proposal. **Journal of Advanced Research**, v. 22, p. 153–162, 1 mar. 2020.
- ALAM, Md. Samrat; CHENG, Tao. Uranium release from sediment to groundwater: Influence of water chemistry and insights into release mechanisms. **Journal of Contaminant Hydrology**, v. 164, p. 72–87, 1 ago. 2014.
- ALDAKHIL, Fatemah *et al.* Lignocellulosic date stone for uranium (VI) uptake: Surface acidity, uptake capacity, kinetic and equilibrium. **Journal of Molecular Liquids**, v. 269, p. 775–782, 1 nov. 2018.
- ALQASAS, Neveen; JOHNSON, Daniel. Lignin as an emerging material in membrane technology for water and wastewater treatment: A review. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 323, p. 147101, set. 2025.
- ARNOLD, Polly L.; LOVE, Jason B.; PATEL, Dipti. Pentavalent uranyl complexes. **Coordination Chemistry Reviews**, 38th International Conference on Coordination Chemistry, v. 253, n. 15, p. 1973–1978, 1 ago. 2009.
- ASOGWA, Fredrick C. *et al.* Adsorption profiles of chlorinated industrial gases on metal (Cu, Mn and Ni) doped fullerenes using DFT, QTAIM and NCI analysis. **Chemical Papers**, v. 78, n. 2, p. 1303–1316, jan. 2024.
- AZAYEZ, Mansour *et al.* Reactivity Study, NCI-RDG Analysis, Molecular Docking and ADMET Investigation of N-(4-Acetyl-5-(4-(nitro)phenyl)-4,5-dihydro-1,3,4-thiadiazol-2-yl)-N-phenyl Acetamide. **Doklady Physical Chemistry**, v. 515, n. 1, p. 25–35, 1 mar. 2024.
- BADER, R. F. W.; ESSÉN, H. The characterization of atomic interactions. **The Journal of Chemical Physics**, v. 80, n. 5, p. 1943–1960, 1 mar. 1984.
- BADER, Richard F. W. **Atoms in Molecules: A Quantum Theory**. Oxford: Clarendon Press, 1990.
- BADER, Richard F. W. A Quantum Theory of Molecular Structure and Its Applications. **Chemical Reviews**, v. 91, n. 5, p. 893–928, jul. 1991.
- BARRERA GIRALDO, José Alejandro *et al.* **Economic and Policy Assessment on Nuclear Energy for Latin America's Energy Transition**. SSRN, , 2025. Disponível em: <<https://www.ssrn.com/abstract=5143447>>. Acesso em: 29 nov. 2025
- BECKE, Axel D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. **The Journal of Chemical Physics**, v. 98, n. 7, p. 5648–5652, 1 abr. 1993.

BEHERA, Biswajit; ARTI; MEHRA, Rohit. Removal of uranium from aqueous solution using cellulose extracted from the leaves of *Musa paradisiaca*. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 226, p. 112125, 1 dez. 2025.

BENEDICT, Manson. The Nuclear Fuel Cycle: An Overview. *In*: OSHIMA, Keichi; MISHIMA, Yoshitsugu; ANDO, Yoshio (Orgs.). **Nuclear Engineering for an Uncertain Future: International Symposium on the 20th Anniversary of the Department of Nuclear Engineering, University of Tokyo**. Boston, MA: Springer US, 1981. p. 31–55.

BIHAIN, Murielly Fernanda Ribeiro; PEREIRA, Anna Karla dos Santos; PEREIRA, Douglas Henrique. Computational Environmental Chemistry as a Strategy for Remediation. *In*: **Green Technologies for Pollutants Remediation and Recovery from Water and Soil**. 1st Edition ed. Boca Raton: CRC Press, 2025. p. 19.

BOTO, Roberto A. *et al.* Interpretation of the reduced density gradient. **Molecular Physics**, v. 114, n. 7–8, p. 1406–1414, 17 abr. 2016.

BRODA, E. *et al.* Structural properties and adsorption of uranyl ions on the nanocomposite hydroxyapatite/white clay. **Applied Nanoscience**, v. 12, n. 4, p. 1101–1111, 1 abr. 2022.

BÜHL, Michael; SIEFFERT, Nicolas; WIPFF, Georges. Structure of a uranyl peroxo complex in aqueous solution from first-principles molecular dynamics simulations. **Dalton Transactions**, v. 43, n. 29, p. 11129–11137, 2 jul. 2014.

CAO, Xiaoyan; DOLG, Michael. Segmented contraction scheme for small-core actinide pseudopotential basis sets. **J. Mol. Struct-THEOCHEM**, v. 673, p. 203–209, 2004.

CAO, Xiaoyan; DOLG, Michael; STOLL, Hermann. Valence basis sets for relativistic energy-consistent small-core actinide pseudopotentials. **J. Chem. Phys.**, v. 118, p. 487–496, 2003.

CHEN, Hang *et al.* Novel graphene oxide/aminated lignin aerogels for enhanced adsorption of malachite green in wastewater. **Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects**, v. 603, p. 125281, 20 out. 2020.

CHEN, Xinyu *et al.* Isotherm models for adsorption of heavy metals from water - A review. **Chemosphere**, v. 307, p. 135545, 1 nov. 2022.

COLLIER, Doug. 16 - Uranium mine and mill remediation and reclamation. *In*: HORE-LACY, Ian (Org.). **Uranium for Nuclear Power**. Oxford: Woodhead Publishing, 2016. p. 415–437.

DARMENBAYEVA, Akmaral *et al.* Cellulose-Based Sorbents: A Comprehensive Review of Current Advances in Water Remediation and Future Prospects. **Molecules**, v. 29, n. 24, 17 dez. 2024.

DENNINGTON, Roy; KEITH, Todd; MILLAM, John. **GaussView, Version 5**. Semichem Inc., Shawnee Mission, KS, , 2009.

DI BERNARDO, Plinio *et al.* Energetics and structure of uranium(VI)-acetate complexes in dimethyl sulfoxide. **Inorganic Chemistry**, v. 51, n. 16, p. 9045–9055, 20 ago. 2012.

EL MAHDAOUI, Amal *et al.* Progress in the modification of cellulose-based adsorbents for the removal of toxic heavy metal ions. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, v. 12, n. 5, p. 113870, out. 2024.

ELSAYED, Nadia H. *et al.* Design of ion-imprinted cellulose-based microspheres for selective recovery of uranyl ions. **Carbohydrate Polymers**, v. 313, p. 120873, ago. 2023.

ETALE, Anita *et al.* Cellulose: A Review of Water Interactions, Applications in Composites, and Water Treatment. **Chemical Reviews**, v. 123, n. 5, p. 2016–2048, 8 mar. 2023.

FAIZAN, Muhammad *et al.* Thermal energy storage integration with nuclear power: A critical review. **Journal of Energy Storage**, v. 96, p. 112577, ago. 2024.

FAQIR, Yahya *et al.* Uranium's hazardous effects on humans and recent developments in treatment. **Ecotoxicology and Environmental Safety**, v. 293, p. 118043, 15 mar. 2025.

FELLER, David. The role of databases in support of computational chemistry calculations. **J. Comput. Chem.**, v. 17, p. 1571–1586, 1996.

FERNÁNDEZ-ARIAS, Pablo; VERGARA, Diego; ANTÓN-SANCHO, Álvaro. Global Review of International Nuclear Waste Management. **Energies**, v. 16, n. 17, p. 6215, jan. 2023.

FRISCH, M. J. *et al.* **Gaussian[®]16 Revision C.01.**, 2016.

GANDHI, T. Pushparaj; SAMPATH, Prasanna Venkatesh; MALIYEKKAL, Shihabudheen M. A critical review of uranium contamination in groundwater: Treatment and sludge disposal. **Science of The Total Environment**, v. 825, p. 153947, 15 jun. 2022.

GAVRILESCU, Maria; PAVEL, Lucian Vasile; CRETESCU, Igor. Characterization and remediation of soils contaminated with uranium. **Journal of Hazardous Materials**, v. 163, n. 2, p. 475–510, 30 abr. 2009.

GE, Yuanyuan; LI, Zhili. Application of Lignin and Its Derivatives in Adsorption of Heavy Metal Ions in Water: A Review. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, v. 6, n. 5, p. 7181–7192, 7 maio 2018.

GOMES, Ellane Jacqueline Coelho Moreira *et al.* Theoretical study of the adsorption capacity of potentially toxic Cd²⁺, Pb²⁺, and Hg²⁺ ions in hemicellulose matrices. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 258, p. 128894, 1 fev. 2024.

GRABOWSKI, Sławomir J. Non-covalent interactions – QTAIM and NBO analysis. **Journal of Molecular Modeling**, v. 19, n. 11, p. 4713–4721, 1 nov. 2013.

GRAHAM, Euan; FULGHUM, Nicolas; ALTIERI, Katye. **Global Electricity Review 2025**. [S.l.]: Ember Energy, 8 abr. 2025. Disponível em: <<https://ember-energy.org/latest-insights/global-electricity-review-2025>>. Acesso em: 29 nov. 2025.

GRENTHE, Ingmar *et al.* Uranium. In: MORSS, Lester R.; EDELSTEIN, Norman M.; FUGER, Jean (Orgs.). **The Chemistry of the Actinide and Transactinide Elements**. Dordrecht: Springer Netherlands, 2006. p. 253–698.

GRIMME, Stefan *et al.* A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. **The Journal of Chemical Physics**, v. 132, n. 15, p. 154104, 16 abr. 2010.

HAHN, O.; STRASSMANN, F. Über den Nachweis und das Verhalten der bei der Bestrahlung des Urans mittels Neutronen entstehenden Erdalkalimetalle. **Naturwissenschaften**, v. 27, n. 1, p. 11–15, 1 jan. 1939.

HAJJI, Melek *et al.* Computational chemistry methods for modelling non-covalent interactions and chemical reactivity— An overview. **Journal of the Indian Chemical Society**, v. 98, n. 11, p. 100208, 1 nov. 2021.

HAN, Duandan; HONG, Qi. Emerging trends in cellulose and lignin-based nanomaterials for water treatment. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 307, p. 141936, maio 2025.

HE, Ying; LIU, Yongqing; ZHANG, Min. Hemicellulose and unlocking potential for sustainable applications in biomedical, packaging, and material sciences: A narrative review. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 280, p. 135657, nov. 2024.

HEFNER, Matthew; MARLAND, Gregg; ODA, Tomohiro. The changing mix of fossil fuels used and the related evolution of CO₂ emissions. **Mitigation and Adaptation Strategies for Global Change**, v. 29, n. 6, p. 56, 19 jul. 2024.

HOKKANEN, Sanna; BHATNAGAR, Amit; SILLANPÄÄ, Mika. A review on modification methods to cellulose-based adsorbents to improve adsorption capacity. **Water Research**, v. 91, p. 156–173, mar. 2016.

HORE-LACY, Ian. 9 - HISTORY OF NUCLEAR ENERGY. *In*: HORE-LACY, Ian (Org.). **Nuclear Energy in the 21st Century**. Burlington: Academic Press, 2007. p. 139–151.

HOSSAIN, Fahim. Natural and anthropogenic radionuclides in water and wastewater: Sources, treatments and recoveries. **Journal of Environmental Radioactivity**, v. 225, p. 106423, 1 dez. 2020.

HUMPHREY, William; DALKE, Andrew; SCHULTEN, Klaus. VMD: Visual molecular dynamics. **Journal of Molecular Graphics**, v. 14, n. 1, p. 33–38, 1 fev. 1996.

IGHALO, Joshua O. *et al.* A review of remediation technologies for uranium-contaminated water. **Chemosphere**, v. 352, p. 141322, 1 mar. 2024.

JHA, Sanjay K. *et al.* Uranium standards in drinking water: An examination from scientific and socio-economic standpoints of India. **Environmental Science and Pollution Research**, v. 31, n. 35, p. 47461–47474, 1 jul. 2024.

JOHNSON, Erin R. *et al.* Revealing Noncovalent Interactions. **Journal of the American Chemical Society**, v. 132, n. 18, p. 6498–6506, 12 maio 2010.

JUMABAEV, Abduvakhid *et al.* Intermolecular interactions in ethanol solution of OABA: Raman, FTIR, DFT, M062X, MEP, NBO, FMO, AIM, NCI, RDG analysis. **Journal of Molecular Liquids**, v. 377, p. 121552, 1 maio 2023.

JUN, Byung-Moon *et al.* Purification of uranium-contaminated radioactive water by adsorption: A review on adsorbent materials. **Separation and Purification Technology**, v. 278, p. 119675, 1 dez. 2021.

JUN, Byung-Moon *et al.* Uranium removal from radioactive wastewater using biochar-based adsorbents: A review on synthesis, performance, and mechanism. **Journal of Water Process Engineering**, v. 75, p. 107956, 1 jun. 2025.

KALTSOYANNIS, Nikolas; LIDDLE, Stephen T. Catalyst: Nuclear Power in the 21st Century. **Chem**, v. 1, n. 5, p. 659–662, 10 nov. 2016.

KARAN, Ram; RAJAN, K. C.; SREENIVAS, T. Studies on lowering of uranium from mine water by static bed ion exchange process. **Separation Science and Technology**, v. 54, n. 10, p. 1607–1619, 3 jul. 2019.

KAUSAR, Abida *et al.* Cellulose-based materials and their adsorptive removal efficiency for dyes: A review. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 224, p. 1337–1355, jan. 2023.

KEITH, Larry S.; FAROON, Obaid M. Uranium. **Handbook on the Toxicology of Metals: Fifth Edition**, v. 2, p. 885–936, jan. 2022.

KEITH, Todd A. AIMAll (Version 17.11. 14). **TK Gristmill Software: Overland Park, KS, USA**, 2017.

KLEMM, D. *et al.* **Comprehensive cellulose chemistry. Volume 1: Fundamentals and analytical methods**. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH, 1998.

KLINGELHÖFER, Doris *et al.* Global research on nuclear energy in the context of health and environmental risks, considering economic interests. **WIREs Energy and Environment**, v. 13, n. 1, p. e497, 2024.

KÜCHLE, W. *et al.* Energy-adjusted pseudopotentials for the actinides. Parameter sets and test calculations for thorium and thorium monoxide. **J. Chem. Phys.**, v. 100, p. 7535–7542, 1994.

KYSER, Kurt. Exploration for uranium. **Uranium for Nuclear Power: Resources, Mining and Transformation to Fuel**, p. 53–76, jan. 2016.

LEE, Chengteh; YANG, Weitao; PARR, Robert G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. **Physical Review B**, v. 37, n. 2, p. 785–789, 15 jan. 1988.

LEVY-ONTMAN, Oshrat *et al.* Biosorption of uranyl ions from aqueous solutions by soluble renewable polysaccharides. **RSC Advances**, v. 13, n. 51, p. 35831–35840, 2023.

LI, Nan *et al.* Atom-scale understanding the adsorption mechanism of uranyl in the interlayer of montmorillonite: Insight from DFT + U calculation. **Applied Surface Science**, v. 612, p. 155910, mar. 2023.

LI, Peng *et al.* Highly Efficient Interception and Precipitation of Uranium(VI) from Aqueous Solution by Iron-Electrocoagulation Combined with Cooperative Chelation by Organic Ligands. **Environmental Science & Technology**, v. 51, n. 24, p. 14368–14378, 19 dez. 2017.

LI, Wei; LIU, Jun; ZHAO, Dongyuan. Mesoporous materials for energy conversion and storage devices. **Nature Reviews Materials**, v. 1, n. 6, p. 16023, 4 maio 2016.

LI, Yinliang *et al.* Synthesis of Magnetic Lignin-Based Hollow Microspheres: A Highly Adsorptive and Reusable Adsorbent Derived from Renewable Resources. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, v. 4, n. 10, p. 5523–5532, 3 out. 2016.

LIU, Bo *et al.* Functional group influence on uranyl ion adsorption by L-cysteine-grafted graphene oxide: A theoretical study. **Ecotoxicology and Environmental Safety**, v. 294, p. 118091, abr. 2025.

LOBATO, Alvaro *et al.* Highs and Lows of Bond Lengths: Is There Any Limit? **Angewandte Chemie International Edition**, v. 60, n. 31, p. 17028–17036, 2021.

LU, Tian; CHEN, Feiwu. Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer. **Journal of Computational Chemistry**, v. 33, n. 5, p. 580–592, 2012.

LV, Ruimin *et al.* Adsorption properties of uranyl ion on NiAl-LDH/Sb: a first-principles study. **Theoretical Chemistry Accounts**, v. 144, n. 7, p. 44, 2 jun. 2025.

MACENA, Morgana *et al.* Competitive Adsorption of Metal Ions by Lignocellulosic Materials: A Review of Applications, Mechanisms and Influencing Factors. **Separations**, v. 12, n. 3, 15 mar. 2025.

MANYATSHE, Alusani; SIBALI, Linda Lunga. A review on the recovery of cellulose, lignin, and hemicellulose biopolymers from the same source of lignocellulosic biomass – Methodology, characterization and applications. **Journal of Water Process Engineering**, v. 70, p. 107037, 1 fev. 2025.

MATHEW, M. D. Nuclear energy: A pathway towards mitigation of global warming. **Progress in Nuclear Energy**, v. 143, p. 104080, 1 jan. 2022.

MATHIVANAN, Mahalakshmi *et al.* Mobilization and health risk assessment of fertilizer induced uranium in coastal groundwater. **Environmental Research**, v. 203, p. 111791, 1 jan. 2022.

MAUTER, Meagan S.; ELIMELECH, Menachem. Environmental Applications of Carbon-Based Nanomaterials. **Environmental Science & Technology**, v. 42, n. 16, p. 5843–5859, 1 ago. 2008.

MELIKOGLU, Mehmet. Advancements in biopolymer production: A review of sustainable approaches and applications. **Next Materials**, v. 10, p. 101513, 1 jan. 2026.

MENG, Peipei *et al.* Cellulose-based materials in the treatment of wastewater containing heavy metal pollution: Recent advances in quantitative adsorption mechanisms. **Industrial Crops and Products**, v. 217, p. 118825, 1 out. 2024.

MICHAELIDES, Efsthathios E.; MICHAELIDES, Dimitrios N. Impact of nuclear energy on fossil fuel substitution. **Nuclear Engineering and Design**, v. 366, p. 110742, 1 set. 2020.

MORGON, Nelson H.; COUTINHO, Kaline Rabelo. **Métodos de química teórica e modelagem molecular**. Editora Livraria da Física, , 2007.

MUNAGAPATI, Venkata Subbaiah *et al.* Adsorptive removal of uranium(VI) from aqueous solutions using amine-modified chitosan: Kinetics, isotherms, thermodynamics, and its mechanistic insights. **Inorganic Chemistry Communications**, v. 179, p. 114692, 1 set. 2025.

MURPHY, Raymond. What is undermining climate change mitigation? How fossil-fuelled practices challenge low-carbon transitions. **Energy Research & Social Science**, v. 108, p. 103390, 1 fev. 2024.

NOBRE, Carlos *et al.* **Brazil Net-Zero by 2040**. Rio de Janeiro: Idealizado pelo Instituto Amazônia 4.0, nov. 2025. Disponível em: <<https://www.abc.org.br/wp-content/uploads/2025/11/brazil-net-zero-by-2040-comprimido.pdf>>. Acesso em: 29 nov. 2025.

Nuclear Power in Brazil - World Nuclear Association. Disponível em: <<https://world-nuclear.org/information-library/country-profiles/countries-a-f/brazil>>. Acesso em: 2 dez. 2025.

PARADIS, Charles J. *et al.* Elucidating mobilization mechanisms of uranium during recharge of river water to contaminated groundwater. **Journal of Contaminant Hydrology**, v. 251, p. 104076, 1 dez. 2022.

PASTORE, Lorenzo Mario; DE SANTOLI, Livio. 100% renewable energy Italy: A vision to achieve full energy system decarbonisation by 2050. **Energy**, v. 317, p. 134749, fev. 2025.

PAULING, Linus. **The Nature of the Chemical Bond and the structure of Molecules and Crystals : an introduction to modern structural chemistry**. 3rd ed. ed. New York: Cornell University Press, 1960.

PELIZZA, Mark S.; BARTELS, Craig S. Introduction to uranium in situ recovery technology. **Uranium for Nuclear Power: Resources, Mining and Transformation to Fuel**, p. 157–213, jan. 2016.

PETRIE, Frankie A. *et al.* Facile fabrication and characterization of kraft lignin@Fe₃O₄ nanocomposites using pH driven precipitation: Effects on increasing lignin content. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 181, p. 313–321, 30 jun. 2021.

PIMENTEL, Helhe Daiany Cabral Silva *et al.* Diethylaminoethyl cellulose and quaternary ammonium cellulose matrices as adsorbent materials for potentially toxic CrO₄²⁻, Cr₂O₇²⁻, SeO₃²⁻ and SeO₄²⁻ anions: A theoretical study. **Journal of Molecular Liquids**, v. 390, p. 123051, nov. 2023.

PRITCHARD, Benjamin P. *et al.* A New Basis Set Exchange: An Open, Up-to-date Resource for the Molecular Sciences Community. **J. Chem. Inf. Model.**, v. 59, p. 4814–4820, 2019.

PRUSTY, Sourav *et al.* Adsorptive sequestration of noxious uranium (VI) from water resources: A comprehensive review. **Chemosphere**, v. 308, p. 136278, dez. 2022.

QUIROGA-BARRIGA, Héctor *et al.* Nuclear Energy as a Strategic Resource: A Historical and Technological Review. **Processes**, v. 13, n. 8, p. 2654, 21 ago. 2025.

RAJ, Kanika *et al.* A comprehensive review of sustainable hydrogels from lignin for advanced wastewater solutions. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 301, p. 139963, abr. 2025.

RANA, B. K. *et al.* A study of natural uranium content in groundwater around Tummalapalle uranium mining and processing facility, India. **Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry**, v. 307, n. 2, p. 1499–1506, 1 fev. 2016.

RAO, Jun *et al.* Hemicellulose: Structure, chemical modification, and application. **Progress in Polymer Science**, v. 140, p. 101675, 1 maio 2023.

REIS, Davi Texeira; RIBEIRO, Igor Hernandes Santos; PEREIRA, Douglas Henrique. DFT study of the application of polymers cellulose and cellulose acetate for adsorption of metal ions (Cd²⁺, Cu²⁺ and Cr³⁺) potentially toxic. **Polymer Bulletin**, v. 77, n. 7, p. 3443–3456, 1 jul. 2020.

RIBEIRO KURAMOTO, Renato Yoichi; APPOLONI, Carlos Roberto. Uma breve história da política nuclear brasileira. **Caderno Brasileiro de Ensino de Física**, v. 19, n. 3, p. 379–392, 2002.

RIOS, Daniel *et al.* On the Origins of Faster Oxo Exchange for Uranyl(V) versus Plutonyl(V). **Journal of the American Chemical Society**, v. 134, n. 37, p. 15488–15496, 19 set. 2012.

RODRÍGUEZ-VILLAGRA, N. *et al.* A snapshot review on uranyl secondary phases formation in aqueous systems. **MRS Advances**, v. 8, n. 6, p. 207–213, 1 jun. 2023.

SALOMONE, Vanesa N. *et al.* New insights in the heterogeneous photocatalytic removal of U(VI) in aqueous solution in the presence of 2-propanol. **Chemical Engineering Journal**, Photocatalysis for disinfection and removal of contaminants of emerging concern. v. 261, p. 27–35, 1 fev. 2015.

SANTOS, Thifany Justo *et al.* Computational study of the interaction of heavy metal ions, Cd(II), Hg(II), and Pb(II) on lignin matrices. **Journal of Molecular Graphics and Modelling**, v. 111, p. 108080, 1 mar. 2022.

SHELLER, Henrik Vibe; ULVSKOV, Peter. Hemicelluloses. **Annual Review of Plant Biology**, v. 61, n. Volume 61, 2010, p. 263–289, 11 mar. 2010.

SCHUCHARDT, Karen L. *et al.* Basis Set Exchange: A Community Database for Computational Sciences. **J. Chem. Inf. Model.**, v. 47, p. 1045–1052, 2007.

SEN, Kamalesh *et al.* Adsorption of uranium (VI) from groundwater by silicon containing biochar supported iron oxide nanoparticle. **Bioresource Technology Reports**, v. 14, p. 100659, 1 jun. 2021.

SETTLE, Frank A. Uranium to Electricity: The Chemistry of the Nuclear Fuel Cycle. **Journal of Chemical Education**, v. 86, n. 3, p. 316, 1 mar. 2009.

SHARFALDDIN, Abeer A. *et al.* Complexation of uranyl (UO₂)²⁺ with bidentate ligands: XRD, spectroscopic, computational, and biological studies. **PLOS ONE**, v. 16, n. 8, p. e0256186, 19 ago. 2021.

SHARMA, Himani *et al.* Fabrication of cellulose-collagen based biosorbent as eco-friendly scavengers for uranyl ions. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 266, p. 131400, maio 2024.

SHEN, Junjie; SCHÄFER, Andrea. Removal of fluoride and uranium by nanofiltration and reverse osmosis: A review. **Chemosphere**, v. 117, p. 679–691, 1 dez. 2014.

ŞİMŞEK, Selçuk *et al.* High-Performance Material for the Effective Removal of Uranyl Ion from Solution: Computationally Supported Experimental Studies. **Langmuir**, v. 38, n. 33, p. 10098–10113, 23 ago. 2022.

ŞİMŞEK, Selçuk; KAYA, Savaş; JALBANI, Nida S. Adsorption properties of amine modified lignin-hydrogel composite for uranyl ions: Theoretical and experimental insights. **Journal of the Indian Chemical Society**, v. 100, n. 2, p. 100924, 1 fev. 2023.

STEPHENS, P. J. *et al.* Ab Initio Calculation of Vibrational Absorption and Circular Dichroism Spectra Using Density Functional Force Fields. **The Journal of Physical Chemistry**, v. 98, n. 45, p. 11623–11627, 1 nov. 1994.

STYLO, Malgorzata *et al.* Biogeochemical Controls on the Product of Microbial U(VI) Reduction. **Environmental Science & Technology**, v. 47, n. 21, p. 12351–12358, 5 nov. 2013.

SUN, Yongchang *et al.* Synthesis of novel lignosulfonate-modified graphene hydrogel for ultrahigh adsorption capacity of Cr(VI) from wastewater. **Journal of Cleaner Production**, v. 295, p. 126406, 1 maio 2021.

SUPANCHAIYAMAT, Nontipa *et al.* Lignin materials for adsorption: Current trend, perspectives and opportunities. **Bioresource Technology**, v. 272, p. 570–581, 1 jan. 2019.

TARAKANOV, Vladimir. **What is Uranium?** text. Disponível em: <<http://www.iaea.org/newscenter/news/what-is-uranium>>. Acesso em: 9 dez. 2025.

The Paris Agreement. Disponível em: <<https://www.un.org/en/climatechange/paris-agreement>>. Acesso em: 29 nov. 2025.

The Paris Agreement | UNFCCC. Disponível em: <<https://unfccc.int/process-and-meetings/the-paris-agreement>>. Acesso em: 29 nov. 2025.

TSURUTA, Takehiko. Removal and recovery of uranyl ion using various microorganisms. **Journal of Bioscience and Bioengineering**, v. 94, n. 1, p. 23–28, 1 jul. 2002.

ULRICH, Shannon *et al.* Hydrogeochemical and mineralogical factors influencing uranium in background area groundwater wells: Grants, New Mexico. **Journal of Hydrology: Regional Studies**, v. 26, p. 100636, 1 dez. 2019.

VIEIRA, Marcus Vinicius Araujo *et al.* Exploring the Nuclear Fuel Cycle: Highlights and Innovations. **Brazilian Journal of Radiation Sciences**, v. 12, n. 4, p. e2508–e2508, 2 out. 2024.

WANG, Jianlong; ZHUANG, Shuting. Extraction and adsorption of U(VI) from aqueous solution using affinity ligand-based technologies: an overview. **Reviews in Environmental Science and Bio/Technology**, v. 18, n. 3, p. 437–452, 1 set. 2019.

WANG, Xiao *et al.* Studies on adsorption of uranium (VI) from aqueous solution by wheat straw. **Environmental Progress & Sustainable Energy**, v. 31, n. 4, p. 566–576, 2012.

WUFUER, Rehemangiang *et al.* Microbial interactions with uranium: Mechanisms, ecosystem impacts, and bioremediation strategies. **Environmental Technology & Innovation**, v. 40, p. 104510, 1 nov. 2025.

XIANG, Zhouyang *et al.* Fabrications and applications of hemicellulose-based bio-adsorbents. **Carbohydrate Polymers**, v. 278, p. 118945, fev. 2022.

XIAO, Weidong *et al.* Recent advances and future perspective on lignocellulose-based materials as adsorbents in diverse water treatment applications. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 253, p. 126984, 31 dez. 2023.

XIE, Yi *et al.* Emerging natural and tailored materials for uranium-contaminated water treatment and environmental remediation. **Progress in Materials Science**, v. 103, p. 180–234, 1 jun. 2019.

ZHANG, Xue *et al.* Real-Time Uranyl Ion Adsorption Monitoring Based on Cellulose Hydrogels. **ACS Applied Polymer Materials**, v. 6, n. 21, p. 13193–13201, 8 nov. 2024.

ZHANG, Yongchao *et al.* Ultrafast adsorption of heavy metal ions onto functionalized lignin-based hybrid magnetic nanoparticles. **Chemical Engineering Journal**, v. 372, p. 82–91, 15 set. 2019.

ZOHURI, Bahman. 6 - Generation IV nuclear reactors. *In*: KHAN, Salah Ud-Din; NAKHABOV, Alexander (Orgs.). **Nuclear Reactor Technology Development and Utilization**. Oxford: Woodhead Publishing, 2020. p. 213–246.