

Dados calorimétricos da interação de Ni(II) e Co(II) na molécula modificada com o agente sililante aminopropil e ácido tioglicólico.

¹Victor Hugo e A. Pinto (IC), ¹Luiza N. H. Arakaki* (PQ), ^{1a}Tomaz Arakaki (PQ), ¹Maria G. da Fonseca (PG), *e-mail: luiza_arakaki@yahoo.com.br

¹Departamento de Química, CCEN, e ^{1a}Departamento Tecnologia de Química e de Alimento, CT, Universidade Federal da Paraíba, 58051-900 João Pessoa – PB;

Palavras Chave: Termoquímica, Calorimetria, agente sililante, ácido tioglicólico

1. INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, tanto pesquisadores acadêmicos como industriais vêm priorizando, cada vez mais, processos químicos que levam em conta considerações ambientais na escolha dos reagentes e condições reacionais. A implementação de tecnologias limpas em atividades industriais em substituição a tecnologias que primeiro sujam, para que depois se limpe, é sem dúvida um grande desafio para a indústria química mundial [1]. O desenvolvimento de novos materiais, como, por exemplo, a modificação da superfície da sílica gel com compostos orgânicos tem sido relatado para aplicação em diversas áreas [2]. A aplicação desses materiais inorgânicos quimicamente modificados com moléculas orgânicas para a remoção e preconcentração dos íons metálicos das soluções é de importância fundamental, especialmente com relação aos estudos de meio ambiente. O propósito desta investigação é desenvolver um novo material contendo centros básicos de nitrogênio, enxofre e oxigênio e que atue como agente quelante para complexar cátions, em condições que não agridam o meio ambiente.

2. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A reação equimolar do agente sililante precursor 3-aminopropiltriétoxisilano (AMP) com a molécula de ácido tioglicólico (TG) resultou na síntese de um novo agente sililante denominado de AMPTG. O novo agente sililante AMPTG, sintetizado pelo processo sol-gel, contém três centros básicos, nitrogênio, oxigênio e enxofre que são potencialmente favoráveis para utilização como agente sequestrante de metais. A habilidade desse material, AMPTG, para extrair cátions divalentes de níquel e cobalto em solução aquosa foi avaliado através de isoterma de adsorção por método de batelada. O número de moles fixos adsorvidos foram 1,70 e 2,2 mmol por grama do material para Ni(II) e Co(II), respectivamente. Este sistema foi titulado calorimetricamente para medir a interação do desses metais com os centros básicos do material, utilizando um micro-calorímetro LKB2277. Durante a titulação, uma ampola é carregada com uma amostra da matriz modificada, suspensas em 2,0 cm³ de água bidestilada, sob agitação a 298,15 ± 0,02 K. A solução termostaticada de metal foi adicionada ao vaso calorimétrico e medido o efeito térmico de reação (Q_{tit}). Assim, nas mesmas condições de titulação foi feita a diluição do titulante em ausência do material (Q_{dil}). O efeito térmico de reação (Q_{res}) foi obtido a partir da equação: $Q_{res} = Q_{tit} - Q_{dil}$. A Figura 1 mostra

as curvas das titulações de Co(II). A partir dos dados obtidos da titulação pode-se obter informações a respeito do equilíbrio envolvido numa reação, como por exemplo, a constante de equilíbrio k , de ionização de prótons e a formação de complexos. A variação de entalpia, ΔH , foi calculada a partir da expressão: $\Delta H = Q_{res} / n^s$; onde n^s é a capacidade máxima de íon metálico adsorvido por grama da matriz adsorvente. Os valores podem ser vistos na Tabela 1.

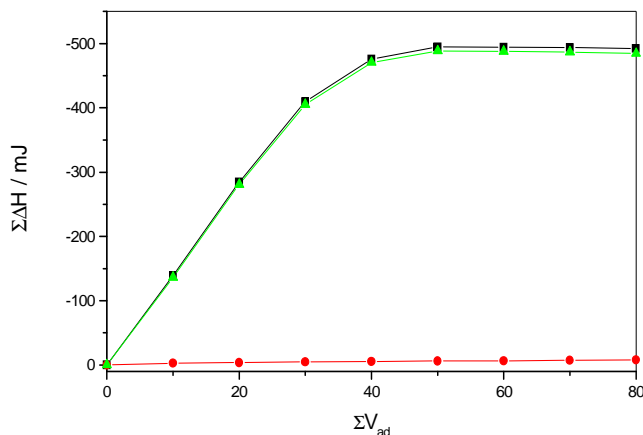


Figura 1. Efeito térmico da titulação na suspensão de 0,01884g do material AMPTG em 2,0 cm³ de água bidestilada na titulação com solução de nitrato de cobalto de concentração de 0,05 mol dm⁻³ à 298,15 ± 0,02 K. A curva resultante(▲) é obtida pela diferença entre a titulação (■) e a diluição (●).

Tabela 1. Dados termoquímicos da interação de Ni(II) e Co(II) no material: número de moles fixo (n_f); valor máximo de adsorção (n^s), Metal (Me) calculada a partir da Eq. modificada de Langmuir.

Me	$n_f, mmol g^{-1}$	$n^s, mmol g^{-1}$	$-\Delta H, kJ mol^{-1}$	$-\Delta G, kJ mol^{-1}$	$\Delta S, J mol^{-1} K^{-1}$
Ni(II)	1,70	1,90	14,4 ± 0,4	41,4 ± 0,1	91 ± 1
Co(II)	2,20	2,61	11,9 ± 0,5	32,2 ± 0,4	68 ± 3

3. CONCLUSÃO

O agente sililante contendo três centros básicos, nitrogênio, oxigênio e enxofre, foi sintetizado pelo processo sol-gel sem a utilização de solvente e a temperatura ambiente obtendo-se um sólido cristalino. A titulação calorimétrica desse material com os metais divalentes de Ni e Co resultou na determinação de variação de entalpia, energia livre de Gibbs e entropia. Para esses sistemas um excelente coeficiente de correlação foi obtido, 0,9999 e 0,9798, para Ni(II) e Co(II), respectivamente. Os resultados da termodinâmica mostraram que há uma espontaneidade evidente na ocorrência de adsorção neste processo iterativo.

4. REFERÊNCIA

- [1] H. E. Toma, F.H. Quina, Simpósio – *Iniciativas em Química Ambiental no Instituto de Química – USP* – São Paulo, Setembro 2002.
 [2] L.N.H.Arakaki, V.L.Augusto Filha, J.G.P. Espínola, M.G.da Fonseca, S.F. de Oliveira, T.Arakaki, C. Airoldi, *J. Environ. Monit.*, 2003, 5, 336.

AGRADECIMENTOS

À **CAPES e CNPq** pelos financiamentos e pelas bolsas concedidas