

## Mobilidade de compostos orgânicos em solo artificial – um experimento de cromatografia de coluna “dry-flash”

Isa Gomes Jorge de Avellar (PQ), Tais Augusto Pitta Garcia Cotta (PQ), Amarílis de Vicente Finageiv Neder\* (PQ). \*finageiv@unb.br

Instituto de Química, Universidade de Brasília, Campus Universitário Darcy Ribeiro, Brasília-DF, CEP 70910-900.

Palavras-Chave: solo, mobilidade, cromatografia “dry-flash”.

### Introdução e Metodologia

Novos cursos de graduação, tais como Ciências Ambientais e Engenharia Ambiental, foram criados em universidades no mundo inteiro em resposta à demanda da sociedade por profissionais com formação adequada para atuar na área ambiental. O currículo desses cursos tem um enfoque multidisciplinar com uma parte significativa das disciplinas relacionadas à Química. Embora questões ambientais sejam intensivamente discutidas nas salas de aula, há poucos experimentos desenvolvidos especialmente para evidenciar relações entre estruturas químicas e o comportamento de substâncias no ambiente. Apresentamos um experimento que pode ser realizado em uma sessão de laboratório de quatro horas, para estudantes de graduação com uma formação prévia em disciplinas experimentais.

O solo é um compartimento ambiental complexo. A contaminação do solo contribui para a poluição de aquíferos e corpos hídricos em geral. A precipitação de chuva e a irrigação artificial sobre o solo contaminado facilitam o transporte de poluentes para águas subterrâneas, que podem vir a ser utilizadas no abastecimento público.

A mobilidade de substâncias orgânicas no solo depende de vários fatores, incluindo a solubilidade em água e sua sorção nas partículas sólidas presentes no solo. Processos de sorção resultam de mais de um tipo de interação: interações de van der Waals (dipolo-dipolo, ligações de hidrogênio, dispersão), interações iônicas e formação de ligações covalentes entre grupos funcionais ativos presentes nas moléculas livres e sítios específicos na fase sólida. Quando uma substância encontra-se dissolvida em uma solução aquosa em contato com sólidos, como aqueles presentes no solo, uma distribuição (ou partição) vai ocorrer entre a fase aquosa e a fase sólida. Partição pode ser entendida como a subdivisão de uma coleção de moléculas de um determinado composto entre duas fases. Como as frações sólidas de matéria orgânica e inorgânica para cada tipo de solo são muito variáveis do ponto de vista quali-quantitativo, a extensão do fenômeno de partição é também muito variável e de difícil determinação em diferentes solos. Para substâncias

orgânicas, a sorção é muito dependente da natureza e percentagem de matéria orgânica presente na amostra de solo. Comumente a constante de partição *n*-octanol-água ( $K_{ow}$ ) é usada como um parâmetro para avaliar o grau de hidrofobicidade da substância e, conseqüentemente, a sua tendência de interagir preferencialmente com a fase orgânica sólida do solo (Tabela 1).

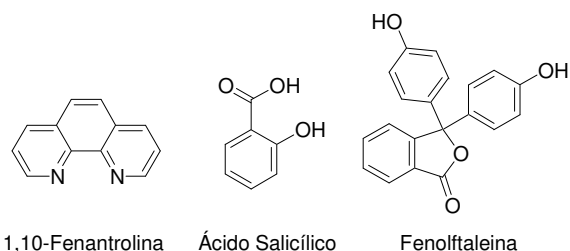
**Tabela 1.** Valores da massa molar (MM), solubilidade em água (S) e logaritmo da constante de partição *n*-octanol-água ( $K_{ow}$ ) para as substâncias estudadas

Nomes	MM (g/mol)	S (mg/L)	log $K_{ow}$
1,10-fenantrolina	180,21	2.690 <sup>a</sup>	1,78 <sup>a</sup>
Ácido salicílico	138,12	2.240 <sup>b</sup>	2,26 <sup>b</sup>
Fenoltaleína	318,32	400 <sup>a</sup>	2,41 <sup>a</sup>

a-Hazardous Substance Data Bank. Disponível em: <<http://toxnet.nlm.nih.gov>>. Acesso em: 12 fevereiro 2010.  
b-KOBETICOVA, K.; BEZCHLEBOVA, J.; LANA, J.; SOCHOVA, I.; HOFMAN, J. *Ecotoxicol. Environ. Safety*, **71**, 650-660, 2008.

Com o objetivo de contribuir para a formação dos futuros profissionais da área ambiental, apresentamos um experimento simples e de baixo custo que focaliza a mobilidade diferencial de três compostos orgânicos em uma coluna cromatográfica do tipo “dry-flash” empacotada com um modelo de solo artificial. A proposta de um solo artificial garante a reprodutibilidade do experimento, o que é importante do ponto de vista didático. Os compostos foram aplicados no topo da coluna e a seguir foi feita a eluição com uma solução diluída de cloreto de cálcio, que simula um meio lixiviante no solo. Os compostos foram selecionados por representarem três tipos de poluentes: 1,10-fenantrolina é um exemplo de um hidrocarboneto aromático policíclico nitrogenado (NPAH), um subproduto industrial; ácido salicílico é o ingrediente ativo de alguns medicamentos e o principal metabólito da hidrólise da aspirina, sendo excretado em dejetos humanos sem, contudo, ser removido nas estações de tratamento; fenoltaleína é um indicador ácido-base empregado em laboratórios e

descartado sem tratamento prévio (Figura 1). Além disso, os três compostos são facilmente identificados, após sua saída da coluna, por testes qualitativos clássicos gerando espécies coloridas. A intensidade da cor se relaciona à concentração de cada composto nas frações.



1,10-Fenantrolina

Ácido Salicílico

Fenolftaleína

**Figura 1.** Estruturas das substâncias estudadas

O procedimento experimental empregou a montagem da coluna cromatográfica “dry-flash” descrita por Schusterman e colaboradores (1). A coluna foi empacotada com 30g de uma mistura contendo 5% de carvão ativo, para simular a matéria orgânica presente nos solos naturais, e 95% de uma mistura de sílica e alumina na proporção 2:1, para simular a fração inorgânica do solo. Utilizamos uma solução de  $\text{CaCl}_2$  0,10g/L para a eluição, simulando a força iônica de um meio lixiviante natural. Uma mistura contendo 0,10g de cada componente, pré-adsorvida em uma pequena fração da fase estacionária, foi aplicada no topo da coluna e esta recoberta por um disco de papel de filtro. Em seguida, introduziu-se uma alíquota de 25mL da solução eluente, aplicou-se sucção e recolheu-se o eluato em tubo de ensaio. Empregando-se esse procedimento, foram coletadas 30 frações. O volume de cada fração recolhida foi dividido em três partes de mesmo volume aproximado. Testes qualitativos específicos foram realizados em cada alíquota resultante da divisão. Na identificação da 1,10-fenantrolina, empregou-se uma solução recém-preparada de sulfato de ferro (II), para formar um complexo avermelhado. Para o ácido salicílico, usou-se um teste de identificação de fenóis com solução de cloreto de ferro (III), que gera um complexo roxo. Já a fenolftaleína foi identificada pela adição de solução de NaOH a 10%, pois este indicador apresenta coloração rósea em meio básico.

## Resultados e Discussão

Os resultados obtidos indicaram que o ácido salicílico foi a substância mais móvel, seguida pela 1,10-fenantrolina e, por último, a fenolftaleína. Considerando os valores de  $K_{ow}$  e solubilidade em água (Tabela 1), seria esperado que o ácido salicílico saísse depois da 1,10-fenantrolina. Entretanto, como o ácido salicílico ( $pK_a = 2,98$ ) encontra-se ionizado nas condições experimentais, a inversão observada pode ser explicada pela maior

solubilidade da espécie iônica. Os resultados demonstram que além do  $K_{ow}$ , outras propriedades são também determinantes na mobilidade de substâncias em um perfil de solo. O experimento evidencia o potencial de migração de substâncias de baixa massa molar nos processos de contaminação de solo seguidos de lixiviação, que tornam lençóis freáticos e aquíferos vulneráveis à poluição.

## Conclusões

A simulação de sistemas ambientais no laboratório é um desafio. No experimento apresentado os estudantes são estimulados a perceber como os processos de sorção e a solubilidade em água controlam a migração de substâncias em um perfil artificial de solo. O experimento, adequado a uma aula prática de quatro horas de duração, é de simples montagem e tem baixo custo. O uso da mistura de sílica, alumina e carvão ativo para simular uma amostra de solo garante um experimento reprodutível para a avaliação do potencial de mobilidade de substâncias em solos. O experimento permite ainda a investigação simultânea da mobilidade de diferentes substâncias.

A abordagem de relevantes questões afetas ao meio ambiente em laboratórios de Química estimula discussões relacionadas com a destinação de poluentes orgânicos e seu transporte entre os diferentes compartimentos ambientais.

1. SHUSTERMAN, A. J.; MCDUGAL, P. G.; GLASFELD, A. Dry-Column Flash Chromatography. *Journal of Chemical Education*, 74 (10), 1222-1223, 1997.