

Adsorção de Metais Pesados em Caulinita: Uma Abordagem Teórica.

Elton A. S. Castro¹(PG)*, João B. L. Martins¹(PQ). eltoncastro@unb.br

Laboratório de Química Computacional, Instituto de Química, UnB, caixa postal – 4478, Brasília-DF, 70904-970, Brasil.

Palavras Chave: *Ab initio*, caulinita, metais.

Introdução

Atividades industriais, aplicação de fertilizantes e deposição de resíduos levam a substanciais acréscimos de metais pesados nos solos. Por carregamento superficial ou percolação, estes metais podem contaminar águas superficiais ou subterrâneas¹. Dentre os vários métodos de tratamento de contaminantes, como precipitação e troca iônica, a adsorção é um dos mais empregados para a remoção de metais pesados². Espécies minerais, como zeolitas e argilas, são bastante usadas como adsorventes. A argila caulim, cujo o principal constituinte é o argilomineral caulinita, é um dos minerais mais abundantes em solos e sedimentos. Resultados experimentais mostraram que este argilomineral pode ser usado para sorver metais pesados como Cd, Pb, Zn, Ni, Cu, etc.

Os objetivos deste trabalho foram verificar a energia de interação dos metais pesados com as superfícies hidroxiladas e dos oxigênios da caulinita através de métodos como ONIOM2(RHF/3-21G** : UFF) e ONIOM2(B3LYP/3-21G** : UFF), bem como a distribuição de cargas e análise de orbitais moleculares destes complexos. Os cálculos foram feitos com o GAUSSIAN-98. Os orbitais moleculares foram desenhados com o software MOLEKEL.

Resultados e Discussão

A energia de interação para o complexo Cádmio/Caulinita obtida com o método ONIOM2(RHF/3-21G** : UFF) foi de -611kJmol⁻¹ para a superfície dos oxigênios da caulinita e de -344kJmol para a superfície hidroxilada da mesma (**Figura 1**). O erro de superposição de bases foi calculado através do método de counterpoise para as duas faces do argilomineral. A diferença para a superfície de SiO foi de 74kJmol⁻¹ e a diferença para a superfície de AlOH foi de 5kJmol⁻¹. As energias encontram-se na **Tabela 1**.

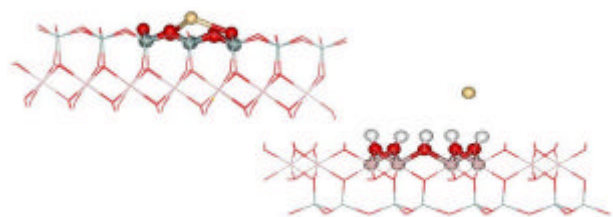


Figura 1. Complexo Cd/Caulinita pela superfície dos oxigênios (superior) e das hidroxilas (inferior).

As cargas foram estimadas com o método de Mülliken para as duas faces do complexo. Percebe-se que com a interação do cátion há uma variação nos valores e esta é mais acentuada para a superfície dos oxigênios ($\delta=0,07$) da caulinita, do que para a superfície hidroxilada ($\delta=0,01$).

Tabela 1. Energias de interação para o complexo Cd/Caulinita, pela face dos oxigênios (Caulin_Cd) e pela face das hidroxilas (Caulin_Cdi), obtidas com o método ONIOM2(HF/3-21G*:UFF).

	Com counterpoise	Sem counterpoise
Caulin_Cd (u.a.)	-7618,982415	-7593,759079
Cd (u.a.)	-5439,401148	-5439,394648
Caulinita (u.a.)	-2179,376628	-2154,131477
DE (kJ/mol)	-537,00	-611,00
Caulin_Cdi (u.a.)	-7343,579545	-7343,579545
Cd (u.a.)	-5439,395295	-5439,394648
Caulinita (u.a.)	-1904,055062	-1904,053846
DE (kJ/mol)	-339,00	-344,00

Conclusões

O argilomineral caulinita demonstrou possuir uma interação forte pela superfície dos oxigênios e mais fraca pela superfície hidroxilada, sugerindo que a adsorção acontece preferencialmente por aquela. A análise das cargas aponta no mesmo sentido. O mapa de superfície propõe que há uma repulsão na face hidroxilada da caulinita.

Agradecimentos

Agradecimentos: CNPq, FINATEC e IQ-UnB.

¹ Miranda-Trevino, J. C.; Coles, C. A. *App. Clay Sci.* **2003**, 23, 133.

² Yavuz, Ö; Altunkaynak, Y.; Güzel, F. *Water research*, **2003**, 37, 948.