

Comparação da reatividade entre diferentes hidrocarbonetos policíclicos aromáticos frente ao processo fotocatalítico sobre TiO_2 .

Denise de Sales Cordeiro* (PG), Geyssa Ferreira Andrade (IC), Paola Corio (PQ).

denise@iq.usp.br

Instituto de Química – Universidade de São Paulo. Av. Prof. Lineu Prestes, 748 -- São Paulo – SP.

Palavras Chave: fotodegradação, Raman, HPA.

Introdução

Os hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (HPA) são amplamente distribuídos na atmosfera e são produtos da combustão incompleta da matéria orgânica¹. Na atmosfera, eles fazem parte do material particulado e despertam particular interesse devido a suas propriedades mutagênicas e efeitos cancerígenos². Visto que estes compostos são de importância para a saúde humana, este trabalho busca, através da espectroscopia Raman, compreender a reatividade de alguns HPA, de acordo com o número de anéis aromáticos, frente ao processo fotocatalítico, bem como identificar os produtos da fotodegradação. Neste trabalho, tais investigações incluem o uso do semicondutor dióxido de titânio (TiO_2) como fotocatalisador.

Resultados e Discussão

Para se estudar a reatividade dos HPA foi feita uma pré-adsorção destas moléculas sobre TiO_2 e este material foi exposto à radiação ultravioleta (254 nm). Após tempos pré-determinados foram obtidos espectros Raman a fim de se acompanhar a formação dos produtos (figuras 1 e 2). Percebeu-se que moléculas com o mesmo número de anéis aromáticos comportam-se de maneira diferente. No caso dos HPA com quatro anéis aromáticos (figura 1), o pireno foi degradado, ao contrário do criseno, que nas mesmas condições não apresentou nenhuma modificação nos modos vibracionais do espectro Raman. A degradação do pireno pode ser constatada através do surgimento do modo vibracional em 1680 cm^{-1} , característico do estiramento $\text{C}=\text{O}$ – o qual indica oxidação do HPA.

No caso dos HPA com três anéis (figura 2) obteve-se a degradação tanto do fenantreno quanto do antraceno. Contudo, nas mesmas condições, obteve-se a completa degradação do fenantreno e a formação de um produto secundário no caso do antraceno. Este é também caracterizado pela presença do modo vibracional em 1680 cm^{-1} , característico de estiramento de carbonila, o mesmo presente no produto de fotodegradação do pireno.

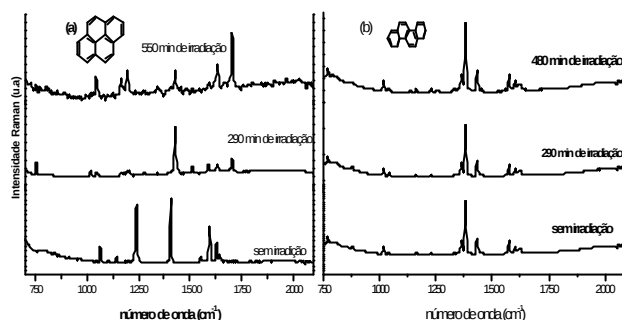


Figura 1. Espectros FT-Raman ($\lambda_{\text{exc.}} = 1064\text{ nm}$) de (a) pireno e (b) criseno sobre TiO_2 em função do tempo de exposição à radiação UV.

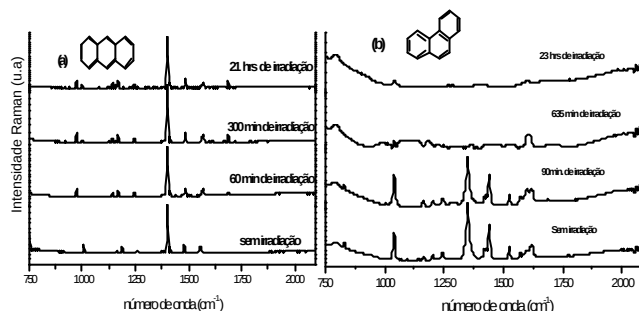


Figura 2. Espectros FT-Raman ($\lambda_{\text{exc.}} = 1064\text{ nm}$) de (a) fenantreno e (b) antraceno sobre TiO_2 em função do tempo de exposição à radiação UV.

Conclusões

O comportamento fotoquímico de diferentes HPA mostra-se bastante dependente do tamanho e da estrutura do HPA considerado. Tais fatores determinam a distribuição de carga do composto e definem, portanto, a sua reatividade e o produto final fotoquimicamente formado. A reatividade depende também da estrutura do HPA, pois quanto mais compacta a molécula, maior sua densidade eletrônica. Dentre as moléculas estudadas, o fenantreno mostrou-se o mais suscetível a reações fotoquímicas, e o criseno foi o menos reativo.

Agradecimentos

Agradecemos o apoio da Fapesp, CNPq e Capes.

¹ Tang, N. et al. *Atmos. Environ.* **2005**, 39, 5817.

² Sabaté, J.; Bayona, J. M.; Solanas, A. M. *Chemosphere* **2001**, *44*, 119.