

# Avanço Molecular da Complexação de sulfato em solução aquosa e em superfícies de Óxido de Ferro

Daniela F. Méier (IC); Rafael N. Pinheiro (IC); Luis F. S. Oliveira\*(IC); Fernando A. Guedes (PQ)

Departamento de Ciências Tecnológicas Ciências Exatas, UNISUL, Av. José Acácio Moreira, 787 Dehon Tubarão, SC. felipeqma@yahoo.com.br

Palavras Chave: complexação, sulfato, óxido de ferro.

## Introdução

O sulfato é um ânion comum em sistemas aquático, além de ter um papel principal nos ciclos elementares em drenagem ácida de mina (DAM), águas alcalinas, e nos ambientes marinhos em que a concentração do sulfato aquoso é elevada. No presente trabalho examinou-se a absorção do sulfato em Fe-óxidos de diversas DAM usando medidas macroscópicas e vibracionais de espectroscópios<sup>1</sup> baseado-se na absorção dependente da força-iônica e ainda as possíveis espécies de S em água de acordo com o potencial redox do meio, simulando assim suas possíveis formas em área de mineração de carvão.

## Materiais e Métodos

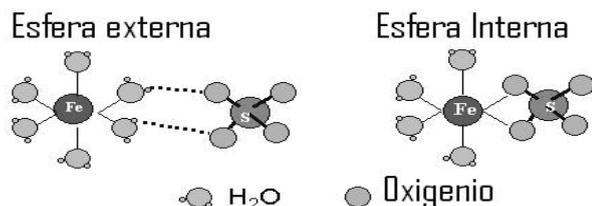
Para identificar os complexos de sulfato em Fe-óxidos, conduziu-se uma investigação detalhada da coordenação deste em diferentes minerais usando o espectroscópio de absorção de raio X e o espectroscópio vibracional.

Quanto às espécies prováveis de enxofre em águas buscou-se oxidar o material sulfetado (31 amostras) abundante na zona de mineração de carvão com peróxido de hidrogênio (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) medindo-se o pH e Eh após vários intervalos de tempo.

## Resultados e Discussão

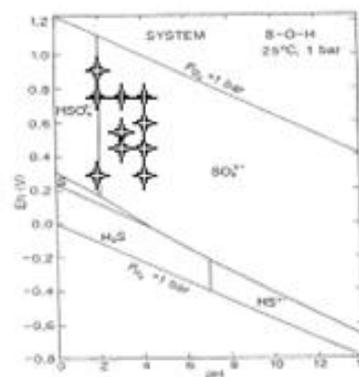
A afinidade (absorção) entre o ânion SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> em superfícies de Fe-óxidos se mostrou evidente podendo assim traçar o esquema da Fig. 1, na qual o diagrama esquemático ilustra os complexos da esfera exteriores e interiores do Fe-sulfato na água.

**Figura 1:** Esferas Interiores e Exteriores com os complexos de SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> em superfície de Fe-óxidos.



Se tratando dos materiais sulfetados, o enxofre como forma inicial em meio aquoso mostrou-se diversas formas destacando-se o ânion SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> e HSO<sub>4</sub><sup>-</sup> (Fig. 2).

**Figura 2:** Diagrama Eh-pH para o material sulfetado oxidado com peróxido de hidrogênio.



## Conclusões

Nossos resultados mostram que o sulfato e também Fe(II), muito provável, existem como monômeros Fe(II)-SO<sub>4</sub> em soluções ácidas. No contraste, o sulfato interage fortemente com o Fe(III). As espécies predominantes em Fe(III)-SO<sub>4</sub> soluções são complexos hidrogênio-ligados aos complexos da esfera-interna (10%). Os dados termodinâmicos sugerem que a maioria do sulfato (~90%) está associado com o Fe(III).

## Agradecimentos

Em especial ao suporte analítico da BASF S.A em particular do gerente Bruno Sina.

<sup>1</sup> Pico D., Ford R. G., Faíscas D. L. *J. Colóide Relação Sci.* **218** . 1999, 289-299.