

Utilização de modelos de complexação superficial na análise do carregamento superficial de SiO₂ e SiO₂ + quitosana (SQTS)

Renata S. Mello (PG)*, Aloísio J. Souza (IC), Janio Venturini Jr(IC), Mauro C. M. Laranjeira (PQ), Faruk Nome (PQ) e Haidi Fiedler (PQ). *rmello@gmc.ufsc.br

Departamento de Química, UFSC, Florianópolis, SC, 88040-900

Palavras Chave: adsorção, modelos de complexação superficiais, Cr(VI).

Introdução

A presença de ligantes orgânicos na forma de filmes aderidos à superfície de oxi-hidróxidos em materiais sedimentares fortemente afeta a distribuição e biodisponibilidade de espécies químicas em meios aquáticos¹.

É sabido que os oxi-hidróxidos apresentam grandes áreas superficiais, caracterizadas pela presença de grupos que promovem o desenvolvimento de cargas em função das condições físico-químicas do meio (p ex. pH e força iônica), favorecendo ou não, a interação com as espécies químicas presentes em solução. A avaliação dessas cargas com o auxílio de modelos de complexação superficial, através de titulações potenciométricas da superfície, permite a descrição do fenômeno levando-se em conta os efeitos da estrutura interfacial. Isto é feito através da introdução de fatores de correção eletrostáticos e de relações de carga – potencial superficial pertinentes ao modelo¹.

O presente trabalho descreve o comportamento de carregamento superficial destes materiais especiais, fornecendo parâmetros físico-químicos intrínsecos às superfícies através da utilização do Modelo da Camada Difusa e do programa FITEQL 4.0. Além disso, as características específicas que esses materiais podem apresentar, permitem sua aplicação nas mais diversas áreas.

Resultados e Discussão

Os valores de concentração, área superficial e eletrólito de fundo dos sistemas utilizados nas titulações potenciométricas para a descrição do carregamento superficial estão na **Tabela 1**.

Tabela 1. Características dos sistemas titulados.

	a (g/L)	S (m ² /g)	[KCl] (mol.L ⁻¹)
SiO ₂	7,06	510	0,001
SQTS	7,06	117	0,001

As curvas de titulação obtidas estão mostradas na **Figura 1**. Para a descrição da superfície da sílica foi considerado um sítio genérico (=SOH), e os equilíbrios de desprotonação e protonação estão apresentados nas equações [1] e [2] respectivamente.



Já para o caso da SQTS, além dos sítios de sílica ainda livres, foi considerado um sítio genérico, SQTS, devido à presença da quitosana na superfície, onde o equilíbrio é descrito pela equação [3].

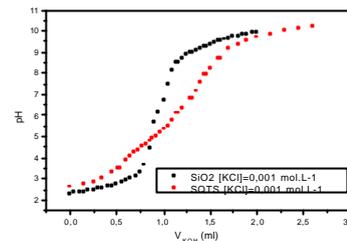
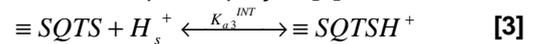
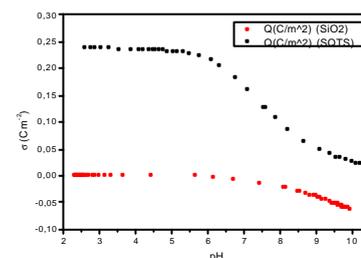


Figura 1. Titulação da sílica (●) e da SQTS (●).

Através da incorporação de termos de correção para o efeito eletrostático da superfície nas leis de ação de massas das equações 1, 2 e 3, e do ajuste numérico das constantes de equilíbrios (K_a^{int}) e número de sítios (N_s) relativos a cada sistema (**Tabela 2**), as cargas podem ser calculadas como mostrado na **Figura 2**.

Tabela 2. Constantes de acidez superficial calculadas utilizando o Modelo da Camada Difusa.

Figura 2. Carga superficial dos sólidos (●) SiO₂ e (●) SQTS, como função do pH.



Conclusões

Em comparação com a sílica o compósito sílica

	N_{SOH}	N_{SQTS}	$\text{p}K_{a1}^{\text{int}}$	$\text{p}K_{a2}^{\text{int}}$	$\text{p}K_{a3}^{\text{int}}$
SOH	$2,64 \times 10^{-3}$	-	-0,5	7,07	-
SQTS	$3,98 \times 10^5$	$2,04 \times 10^3$	-0,5	7,07	10,49

quitosana apresenta uma carga positiva abaixo de pH~10, este comportamento confere ao material (SQTS) capacidade de remoção de espécies aniônicas.

Agradecimentos

Agradecemos a Capes, CNPq, PRONEX e UFSC.

¹Nome,R.A; Martínez,C.M.; Nome,F.; Fiedler,H.D. *Env.Tox. and Chem.* **2001**, 20: 693.

²Fritzen, M. B.; Souza, A. J.; Silva, T. A. G.; Souza, L.; Nome, R. A.; Fiedler, H. D.; and Nome, F.. *J.Coll.Int.Sc.* **2005**, *na imprensa*.