

## Estudo da reação entre amônio e tiocianato simulando condições de hidrotermais

Cláudio M.D. de Souza (IC)<sup>1</sup>, Henrique de Santana (PQ)<sup>1</sup>, Cássia Thaís B. V. Zaia (PQ)<sup>2</sup>, Dimas A. M. Zaia<sup>1</sup> (PQ)<sup>1\*</sup> (damzaia@uel.br)

Departamento de Química-CCE<sup>1</sup>, Departamento de Ciências Fisiológicas-CCB<sup>2</sup>, Universidade Estadual de Londrina, 86051-990, Londrina-PR

Palavras Chave: Hidrotermais, decomposição, química prebiótica.

### Introdução

French<sup>1</sup> foi o primeiro cientista a reconhecer e Corliss et al.<sup>2,3</sup> os primeiros a sugerirem que respiradouros hidrotermais submarinos poderiam ter desempenhado um importante papel na origem da vida na Terra. Diversas vantagens podem ser citadas para o uso de condições simulando respiradouros hidrotermais submarinos para a síntese de biomoléculas: as biomoléculas e biopolímeros estariam protegidas de raios UV provenientes do sol; os gradientes de temperaturas forneceriam energia e diferentes sítios para diferentes reações; em temperatura e pressão elevadas a água adquire características de solvente orgânico e os sais da água do mar, metais de transição e argilas dos respiradouros hidrotermais catalisariam as sínteses de biomoléculas e biopolímeros. Amônio e tiocianato têm sido sintetizados em experimentos em condições de reação da química prebiótica ou têm sido encontrados em alguns destes ambientes ainda existentes na Terra. Neste trabalho, é descrito a reação de decomposição de tiocianato de amônio em solução de água do mar sintética, sob altas temperaturas e pressões e diversos minerais.

### Resultados e Discussão

Dados da quantidade de tiocianato decomposta, [D], em µg/ml, todas as amostras têm concentração inicial de 7166,0 µg/ml. **NH<sub>4</sub>SCN**: [D]= 2541,6, pH final=7,01; **NH<sub>4</sub>SCN + caulinita**: [D]= 4729,6, pH final=5,43; **NH<sub>4</sub>SCN + bentonita**: [D]= 1435,0, pH final=5,43; **NH<sub>4</sub>SCN + montmorilonita**: [D]= 5872,0, pH final=2,99; **NH<sub>4</sub>SCN + quartzo**: [D]= 4423,6, pH final=6,32. Os dados acima mostram a decomposição de tiocianato de amônio (NH<sub>4</sub>SCN 0,010 mol. L<sup>-1</sup>) dissolvido em água do mar com pH inicial de aproximadamente entre 7,00 e 7,20 na presença de diversos minerais (Caulim, bentonita, montmorilonita e quartzo). As amostras foram aquecidas a 200°C por 24 horas, a água do mar sintética usada neste trabalho contém todos os elementos de maiores concentrações presentes naturalmente. Como mostram os resultados a montmorilonita apresentou a maior decomposição do tiocianato, este resultado pode ser atribuído parcialmente à presença de grande quantidade de Fe (III) nesta argila. No entanto este não deve ser o único fator visto que o quartzo não tem Fe (III) em sua

composição e apresentou resultados semelhantes aos obtidos para a caulinita. Outro fato que chama a atenção é a grande diminuição do pH na amostra de montmorilonita, no entanto a amostra de quartzo não apresentou uma grande alteração do pH quando comparado com as amostras de caulinita e bentonita. Os espectros infravermelhos das amostras liofilizadas de tiocianato de amônio em água do mar, aquecidas por 24 h a 200°C (dados não mostrados) mostram, que ocorre uma diminuição de intensidade na banda em 1400 cm<sup>-1</sup> atribuída à deformação de ângulo NSC. Por outro lado, foi observado nestes espectros o aparecimento de novas bandas nas frequências 605 cm<sup>-1</sup>, 670 cm<sup>-1</sup> e 1143 cm<sup>-1</sup> nas amostras de tiocianato em água do mar aquecidas. Estas bandas 605 cm<sup>-1</sup>, 670 cm<sup>-1</sup> e 1143 cm<sup>-1</sup> podem ser associadas à presença do íon sulfato (SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>). O íon sulfato está presente na composição da água do mar, sintética, utilizada na forma de MgSO<sub>4</sub>, CaSO<sub>4</sub> e K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. Já nos espectros de tiocianato de amônio aquecido na presença de minerais (bentonita, caulinita e montmorilonita), observou-se a diminuição de intensidade das frequências em 1400 cm<sup>-1</sup>, 1628 cm<sup>-1</sup> e 2019 cm<sup>-1</sup> estas frequências são características do tiocianato de amônio. Essa diminuição na intensidade destas bandas características indica a decomposição do tiocianato, fato este, que corrobora com os resultados obtidos, da decomposição do tiocianato, por espectroscopia UV-VIS. No entanto não foi observada nenhuma nova banda que indique o surgimento de alguma molécula complexa.

### Conclusões

Os resultados apresentados pela espectroscopia UV-VIS e Infravermelho FT-IR mostram que nas condições experimentais aqui estudadas, ocorre uma significativa decomposição do tiocianato e que esta decomposição pode ser influenciada pela presença de determinados minerais. Não foi possível determinar uma eventual formação de novos compostos, devido à presença de alguns sais contidos na água do mar utilizada, que interferem no método utilizado.

### Agradecimentos

O presente projeto foi financiado pela Fundação Araucária e CNPq.

<sup>1</sup> French, B. M. 1. *Synthesis and stability of siderite, FeCO<sub>3</sub>*. 2. *progressive contact metamorphism of the Biwabik Iron Formation on the Mesabi range, Minnesota* [Ph.D thesis], The Johns Hopkins University, Baltimore. **(1962)**

<sup>2</sup> Corliss, J. B.; Dymond, J.; Gordon, L. I.; Edmond, J. M.; von Hazen, R. P.; Ballard, R. D.; Green, K. K.; Williams, D.; Bainbridge, A.; Crane, K.; van Andel, T. H.; *Science* **1979**, 203, 1073.

<sup>3</sup>Corliss, J. B.; Baross, J. A.; Hoffman, S. E.; *Oceanol. Acta* **1981**, 4-suppl., 59.