

Estudo da Adsorção do Ácido Cafeico em Dióxido de Titânio.

Kassio Papi da Silva Zanoni (IC), Bianca Martins Estevão (IC), Sônia Regina Giancoli Barreto(PQ), Wagner José Barreto* (PQ). barreto@uel.br

¹Universidade Estadual de Londrina, Laboratório de Físico-Química Ambiental, Departamento de Química. Campus Universitário, 86051-990, CP 6001, Londrina-PR.

Palavras Chave: Ácido Cafeico, TiO₂, Isoterma, Espectroscopia.

Introdução

O ácido *trans*-3-(3,4-dihidroxifenil)propenóico, ou Ácido Cafeico (AC) tem chamado a atenção por suas propriedades inibidoras de carcinogênese, anti-oxidante, anti-viral, anti-inflamatório e anti-reumático (Cilliers et al., 1991). A adsorção é considerado um fenômeno em que o adsorvato se liga por meio de interações físicas ou químicas com adsorventes. A isoterma de Brunauer-Emmet-Teller (BET) pressupõe que as moléculas sejam adsorvidas em camadas sobrepostas após a monocamada. A equação de reta que descreve este sistema é

$$\frac{C_{eq}}{(C_s - C_{eq}) \frac{x}{m}} = \frac{1}{bK_b} + \frac{(K_b - 1)}{bK_b} \left(\frac{C_{eq}}{C_s} \right)$$

onde x é a massa de adsorvato (mg) que aderiu à superfície do adsorvente, m é a massa de adsorvente (g), b é a constante que representa a máxima adsorção possível na primeira monocamada (mg_{adsorvente} g⁻¹_{adsorvato}), K_b é a constante que representa a saturação de todas as camadas (mg_{adsorvente} g⁻¹_{adsorvato}), C_{eq} é a concentração do fluido em equilíbrio e C_s é a concentração do soluto necessária para ocorrer a saturação de todas as camadas. O objetivo deste trabalho foi caracterizar a adsorção do AC em TiO₂, a 60 °C, utilizando a espectroscopia UV-Vis. Espectros UV-Vis da solução aquosa de AC antes da adição de TiO₂ e após 90 minutos de reação foram obtidos, e a diferença entre eles indicaram que houve diminuição da intensidade das bandas devido à adsorção no TiO₂ e não houve formação de produtos de reação ou polimerização do AC em solução. Após a adição de TiO₂ à solução aquosa de AC a 60°C o óxido passou de branco para amarelo, com aumento do pH de 3,8 para 4,8. Após 90 minutos de reação, a mistura foi filtrada, armazenando-se o pó retido (TiO₂-AC).

Resultados e Discussão

Em trabalho anterior² foram atribuídas as frequências vibracionais dos espectros IV e Raman do AC e do TiO₂-AC. Estas informações levaram à conclusão que a adsorção do AC em TiO₂ ocorreu com a interação do grupo orto-difenol e da dupla ligação da cadeia lateral do AC, mostrada de forma esquematizada na Figura 1. Usando-se a absorvidade molar do AC ($\epsilon=12,47 \text{ L mmol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$) e as diferenças nas absorvâncias em função da

concentração, obteve-se a isoterma mostrada na Figura 2A.

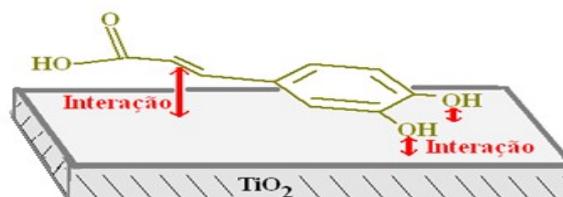


Figura 1. Proposta de adsorção do AC em TiO₂

Os dados foram melhores ajustados com a equação de BET, obtendo-se uma reta com R²=0,999, Figura 2B, caracterizando a adsorção como uma isoterma de tipo II, em forma de S. O máximo de adsorção da primeira camada foi de 68,15 mg_{AC} g⁻¹_{TiO2} e a cobertura de saturação de todas as camadas 195,4 mg_{AC} g⁻¹_{TiO2}.

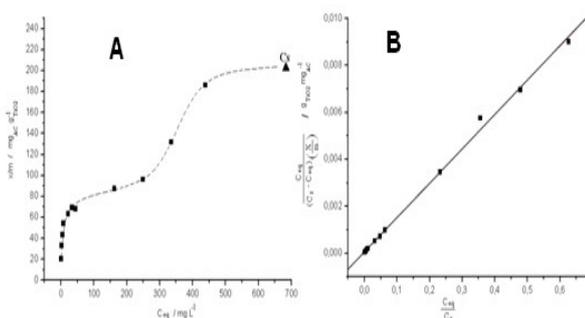


Figura 2. (A) Isoterma da adsorção de AC em TiO₂ a 60 °C, (B) dados ajustados pela equação de BET.

Conclusões

Observou-se a adsorção do ácido cafeico com TiO₂, que deve ocorrer por interações dos oxigênios da função o-difenol com a superfície do TiO₂, com contribuição da dupla ligação da cadeia lateral. A adsorção foi melhor ajustada com a isoterma de BET sendo obtidos os parâmetros de adsorção.

Agradecimentos

À Fundação Araucária pela bolsa concedida. Ao CNPq e Fundação Araucária pelo apoio financeiro

¹CILLIERS, J. J. L.; SINGLETON, V. L. *Journal of Agriculture and Food Chemistry*, **1991**, 39, 1298-1303.

²BARRETO et al. *49º Congresso Brasileiro de Química*, Porto Alegre, Livro de Resumos, **2009**.