

Estudo da adsorção do ácido cafeico em óxido de zinco.

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

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

Palavras Chave: ácido cafeico, óxido de zinco, adsorção.

Introdução

O ácido caféico (AC) derivado do ácido hidroxicinâmico, Figura 1, ocorre naturalmente em muitas plantas, juntamente com outras moléculas polifenólicas. Este composto desempenha um papel importante na química do solo participando do transporte de metais iônicos e também é um poderoso anti-oxidante.

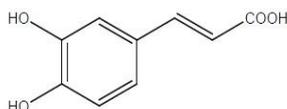


Figura 1. Estrutura do ácido caféico

O ZnO, juntamente com outros fotocatalisadores, é importante em processos que envolvem reações induzidas pela radiação. O mecanismo de fotocatalise heterogênea baseia-se na adsorção de um reagente em superfície seguido de irradiação do semicondutor para que a reação ocorra. O mecanismo de Langmuir-Hinshelwood descreve simplificada as reações que ocorrem durante a degradação fotocatalítica na interface sólido-líquido. De acordo com o mecanismo de Langmuir-Hinshelwood, a velocidade da reação catalítica pode ser descrita pela equação:

$$r = -\frac{dC}{dt} = k_v \cdot \theta = \frac{k_v K_{eq} C}{1 + K_{eq} C}$$

sendo que k_v é a constante de velocidade, r é a velocidade de degradação da substância, C é a concentração e K_{eq} é a constante de equilíbrio. O objetivo deste trabalho foi estudar a adsorção e a cinética de fotodegradação do ácido caféico em superfície de ZnO a 60°C em solução aquosa. Adicionou-se ZnO à uma solução de AC aquecida a 60°C. Observou-se a modificação gradativa da cor, de branco para roxo, e a variação de pH de 3,8 para 5,0. Estudou-se a cinética da reação obtendo-se os espectros UV-Vis de alíquotas da solução durante 300 min. A diminuição da intensidade das bandas características do AC com o tempo, indicou a degradação da substância e a formação de novos produtos.

Resultados e Discussão

A cinética foi analisada usando o mecanismo de Langmuir-Hinshelwood, para verificar se a reação seguia uma lei de velocidade de primeira ordem ou pseudo-ordem zero. Observou-se que mesmo aumentando a concentração de AC em 25 vezes a reação se apresentou de primeira ordem, de acordo com o mecanismo de Langmuir-Hinshelwood, não ocorrendo saturação dos sítios ativos na superfície. As equações dos estudos cinéticos são mostradas na Tabela 1.

Tabela 1. Parâmetros cinéticos da reação de primeira ordem mantendo-se fixa a quantidade de ZnO (0,200g).

| AC/g | Equação da reta | R | k_a /min |
|-------|---------------------------|-----|------------|
| 0,00 | $Y = -0,1658 - 0,00597x$ | 0,9 | 0,0059 |
| 0,042 | $Y = 0,05613 - 0,00529x$ | 0,9 | 0,0052 |
| 0,085 | $Y = 0,04870 - 0,00414x$ | 0,9 | 0,0041 |
| 0,220 | $Y = -0,06429 - 0,00288x$ | 0,9 | 0,0028 |

Em trabalho anterior² comparou-se os espectros FTIR e Raman obtidos após a reação com o espectro do AC puro, observando-se diferenças e o desaparecimento de frequências vibracionais sugerindo a possível formação de um p-vinilcatecol adsorvido através dos oxigênios o-difenol, que são altamente reativos e que poderiam se polimerizar em solução.

Conclusões

Concluiu-se que a reação entre ácido cafeico e ZnO em solução aquosa pH 5 é uma reação fotocatalítica de primeira ordem que possivelmente seguiu um mecanismo de Langmuir-Hinshelwood. A espectroscopia no IV e Raman sugeriram a formação de diferentes substâncias na superfície devido à diferença de recobrimento do ZnO.

Agradecimento

Ao CNPq pela bolsa IC e à Fundação Araucária e CNPq pelo auxílio recebido.

Dovbii, O.A.; Kazakova, O.A.; Lipkovskaya, N.A. Colloid Journal, 2006, v.68, p.707-712.

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