

Funcionalização de carvão para uso como ligante macromolecular.

Liliam C. Angelo (PG)^{1*}, Karen M. Mantovani (IC)¹, Antonio S. Mangrich (PQ)¹.
liliam.angelo@gmail.com

¹Departamento de Química da Universidade Federal do Paraná. Centro Politécnico da UFPR, CP 19081, Jardim das Américas, CEP 81531-980.

Palavras Chave: Funcionalizar, carvão, ligante macromolecular, FTIR, EPR.

Introdução

A funcionalização de materiais como nanotubos de carbono e carvão tem sido um desafio químico. O HNO₃ está entre os agentes de funcionalização mais utilizados nos processos^{1,2}. Neste trabalho funcionalizou-se carvão vegetal para produzir ligantes macromoleculares por reação com HNO₃. O material obtido foi caracterizado por espectroscopias de FTIR e EPR.

Resultados e Discussão

A figura 1 mostra os espectros de FTIR de amostras do carvão vegetal (CV) puro, e tratado com mistura HNO₃/H₂SO₄ (R1), e com HNO₃ em refluxo por 6 h (R2) e por 1 h (R3). Verifica-se que os tratamentos com HNO₃ (R2, R3) levaram a formação de grupos Φ -COOH (bandas em 1250 e 1720 cm⁻¹), e grupos Φ -NO₂ (bandas em 1340 e 1540 cm⁻¹).

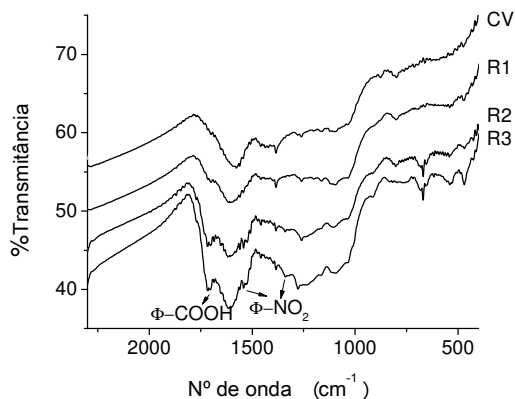


Figura 1. Espectros de infravermelho das amostras CV, R1, R2 e R3 (ver texto).

Tabela 1. Parâmetros de EPR das amostras.

Amostra	Spin/g	Fator g	ΔH_{pp} (G)
CV	$2,21 \times 10^{18}$	2,0030	4,3
R1	$6,29 \times 10^{18}$	2,0030	4,2
R2	$6,39 \times 10^{18}$	2,0031	3,2
R3	$5,85 \times 10^{18}$	2,0031	2,8

A tabela 1 apresenta os parâmetros de EPR, densidade de spins (spins/g), fator g e largura de

34^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

linha (ΔH_{pp}). A densidade de spins das amostras quase triplica da amostra CV para as amostras R1, R2 e R3, sugerindo perda de material diamagnético, ou geração de radical livre orgânico (RLO) com os tratamentos. Os valores do fator $g = 2,0030$ a $2,0031$, indicam RLO em átomos de carbono para todas as amostras. As larguras de linhas ΔH_{pp} sugerem poucas interações dos RLO com átomos mais pesados para as amostras CV e R1, enquanto que nas amostras R2 e R3, os RLO estão somente ligados as estruturas de carbono.

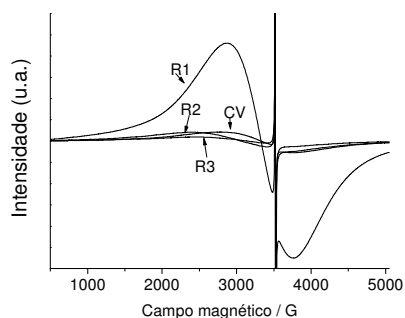


Figura 2. Espectros de EPR das amostras CV, R1, R2 e R3, em campo magnético de 500 a 5050 G.

A figura 2 mostra, além da linha estreita de radical livre orgânico para todas as amostras analisadas, que somente a amostra R1 apresenta linha larga intensa de Fe³⁺ em domínios concentrados, típica de complexos com o íon sulfato e com átomos de oxigênio de fenolatos, em simetria C_{2v} (Φ -O₂-Fe-O₂SO₂)³.

Conclusões

Os resultados mostraram que o tratamento com ácido nítrico (6 mol/L 1 h de refluxo a 78 °C) foi o mais eficiente para funcionalizar o carvão vegetal. IV e EPR indicaram que a solução de HNO₃ foi mais eficiente na oxidação e nitração do carvão vegetal que a mistura sulfonítrica.

Agradecimentos

UFPR, CAPES, CNPq, FINEP.

¹ Mangrich, A.S.; Vugman, N.V. *Fuel* **1990**, *69*, 925.

² Kanai, Y. et al. *Phys. Rev. Letters*, **2010** *104*(6), 066401.

³ Nicolini, K. *Tese de doutorado*, **2009**, DQ/UFPR.