

Modelagem de Distribuição de Espécies de Cr(III) na Interface entre Sílica Gel e Soluções Aquosas

Muhammad Idrees (PG), Marcelo Silva (PG), Jociane Bruch (IC), Lizandra M. Zimmermann (PG), Alessandra F. da Silva (PG), Haidi D. Fiedler (PQ), Faruk Nome (PQ)

Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia – Catálise, Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Química, Florianópolis, SC. *fiedler@qmc.ufsc.br

Palavras Chave: cromo III, adsorção, sílica, pH, isotermas de Langmuir

Introdução

O cromo possui muitas aplicações em processos industriais e, conseqüentemente, é comum ser encontrado em águas superficiais e subterrâneas, além de ocorrer naturalmente em rochas ultramáficas.¹ Um dos materiais em abundância no meio natural são os alumino-silicatos hidratados, cuja superfície em águas naturais sofre reações de hidrólise as quais originam carga superficial.^{1,2} Os processos interfaciais de poluentes aquosos podem controlar o transporte, especiação e o destino definitivo dos mesmos para as águas subterrâneas.³ O cromo é encontrado em vários estados de oxidação desde -II até +VI. Em condições oxidantes é altamente solúvel e móvel, apresentando-se como Cr(VI) nas formas de cromato (CrO_4^{2-}) e hidrogênio cromato (HCrO_4^-), as quais são muito perigosas. Em condições redutoras, o Cr(VI) pode ser convertido para Cr(III), o qual é menos solúvel e fortemente adsorvido em superfícies sólidas.¹ A superfície da sílica gel possui cargas diferenciadas em função do pH, formando uma dupla camada na interface adsorvente/água que é determinante na adsorção de íons metálicos.^{3,4} Este trabalho apresenta um estudo da adsorção do Cr(III) sobre sílica gel, quantificada pela supressão da fluorescência das sondas naftaleno ou pireno provocada pelo Cr(III).⁵

Resultados e Discussão

A cinética de adsorção do Cr(III) na sílica é rápida e o equilíbrio é alcançado em < 1 hora. Os dados experimentais e simulados (utilizando FITEQL) das adsorções de Cr(III) em sílica, em função do pH são apresentados na Figura 1A e 1B respectivamente. As linhas contínuas na Figura 1A representam o ajuste teórico com isotermas de Langmuir (Equação 1), calculadas utilizando regressão não-linear.

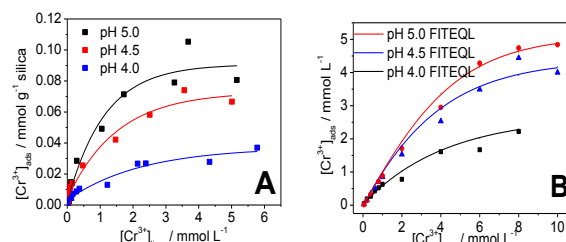
$$\theta = K_L [\text{Cr(III)}] M / (1 + K_L [\text{Cr(III)}]) \quad (1)$$

Na equação 1, θ corresponde à quantidade adsorvida por grama de sílica (mmol/g sílica); K_L é a constante de Langmuir; M representa a adsorção máxima (mmol/g sílica); e $[\text{Cr(III)}]$ corresponde à concentração de cromo livre. Na Figura 1A pode ser observado que a adsorção depende do pH e, os parâmetros de Langmuir na Tabela 1, mostram um valor máximo em pH 5,0.

pH	M (mmol g ⁻¹)	K_L (L mmol ⁻¹)
4.0	0.036	2.39
4.5	0.066	9.16
5.0	0.080	14.9

Tabela 1. Parâmetros de Langmuir para a adsorção de Cr(III) em sílica.

O Cr(III) livre determinado pela supressão da fluorescência do naftaleno em meio micelar, e por UV-Vis com difenilcarbazida.



Figuras 1A. Isotermas de adsorção de Cr(III) em sílica em função do pH. 1B. Isotermas ajustadas com FITEQL.

Os dados experimentais e os dados ajustados com o programa FITEQL (Figuras 1A e 1B) apresentam o comportamento de uma isoterma de Langmuir e, a adsorção de Cr(III) ocorre com exclusão de Na^+ , como demonstrado por cromatografia iônica (Figura 2).

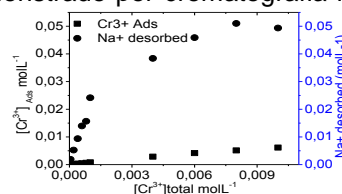


Figura 2: Relação entre Cr(III) adsorvido e Na^+ desorvido.

Conclusões

A sílica em pH 5,0 adsorve uma quantidade maior de Cr(III) e os dados são consistentes com isotermas de Langmuir, com exclusão de Na^+ .

Agradecimentos

CNPq, FAPESC, PRONEX, TWAS

¹Fritzen, B. M.; Fiedler, D. H.; *et al.* *J Colloid and Interface Science* 296 (2006) 465-471. ²Musorrafiti, M.J.; Geiger, F.M. *et al.* *J. Phys. Chem. C* (2008) 2032-2039. ³Nome, R. *et al.* *Environ. Toxicol. Chem.* 29 (2010) 2426-2431. ⁴Zimmermann, L.Z, Fiedler, H.D. *et al.* *J. Phys. Chem. C* 114 (2010) 15078-15083. ⁵Silva, A; Fiedler, H. D.; Nome, F. *J. Phys. Chem. A*, no prelo.