

Adsorção de compostos fenólicos em nanotubos de carbono de paredes múltiplas: uma abordagem termodinâmica

Cassiano Rodrigues de Oliveira (PG)¹, Rodrigo Lassarote Lavall (PQ)^{1,2}, Aparecida B. Mageste (PG)¹, Maria do Carmo Hespagnol da Silva (PQ)¹, Luis Henrique Mendes da Silva (PQ)^{1*}. *luhen@ufv.br*

¹Grupo de Química Verde Coloidal e Macromolecular (QUIVECOM), Departamento de Química, Universidade Federal de Viçosa. ²Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais.

Palavras Chave: adsorção, compostos fenólicos, nanotubos de carbono de paredes múltiplas e microcalorimetria.

Introdução

O aumento na produção e aplicação de nanotubos de carbono (CNTs) vem demandando pesquisas básicas e aplicadas. O estudo da natureza das interações entre os CNTs e diferentes compostos (polímeros, surfactantes, compostos aromáticos, etc.) é crucial, uma vez que estas são determinantes na dispersão dos CNTs. Neste trabalho, será determinada a termodinâmica de adsorção de diferentes compostos fenólicos (CF) à nanotubos de carbono de paredes múltiplas (MWCNTs).

Resultados e Discussão

A Figura 1 apresenta as isotermas de adsorção dos diferentes CF: fenol, 3-hidroxifenol e 4-hidroxifenol em MWCNTs.

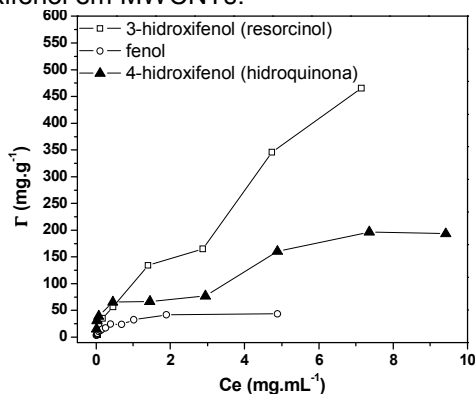


Figura 1. Isotermas de adsorção dos CmFs em MWCNT. As linhas são guias para os olhos.

A adsorção dos CF nos MWCNTs seguiu a seguinte ordem: fenol < 4-hidroxifenol < 3-hidroxifenol. A quantidade adsorvida (Γ) aumenta com o aumento do número de hidroxilas, mas é dependente da posição dos grupos OH (Hammett σ_{OHmeta} = 0,12; Hammett σ_{OHpara} = -0,37). A adsorção do 4-hidroxifenol acontece com a formação de multicamadas, verificando-se dois patamares na isoterma (Fig.1). Dados de microcalorimetria (Fig. 2) mostram a existência de diferentes sítios de adsorção presentes na interface MWCNT/solução. A entalpia de adsorção inicialmente é exotérmica aumentando o seu valor até tornar-se praticamente igual a zero. Esta variação em $\Delta_{ads}H$ pode ser atribuída a existência de

diferentes grupos funcionais na superfície dos MWCNTs (hidroxila, carbonila, carboxila, etc.) que permitem interações específicas com os compostos fenólicos como o fenol e o 3-hidroxifenol.

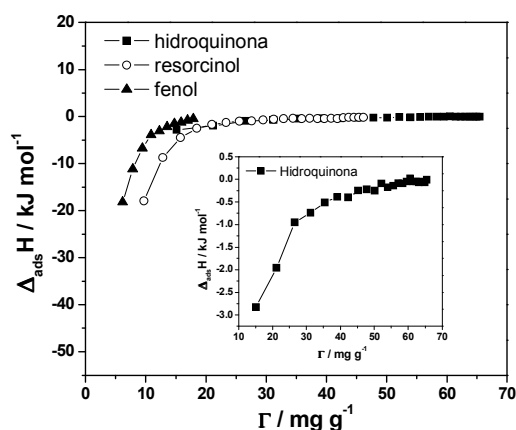


Figura 2. ΔH de adsorção x quantidade adsorvida (Γ) dos diferentes compostos fenólicos em MWCNT.

Os valores das propriedades termodinâmicas (Tab.1) de adsorção indicam que o processo de adsorção do fenol e 3-hidroxifenol é entalpicamente controlado, enquanto que para o 4-hidroxifenol, tanto a entalpia (devido a forças de dispersão) quanto a entropia (efeito hidrofóbico) contribuem para a adsorção em multicamadas observada na isoterma (Fig.1).

Tabela 1. Propriedades termodinâmicas de adsorção

| Sistema | $\Delta_{ads}G^{\circ}$ | $\Delta_{ads}H^{\circ}$ | $T\Delta_{ads}S^{\circ}$ |
|----------------|-------------------------|-------------------------|--------------------------|
| fenol | -13,18 | -31,08 | -17,90 |
| 3-hidroxifenol | -15,70 | -59,31 | -43,61 |
| 4-hidroxifenol | -18,14 | -3,65 | +14,49 |

Conclusões

O processo de adsorção de compostos fenólicos em MWCNT é muito dependente da estrutura do CF e grupos específicos nas Interfaces do MWCNT.

Agradecimentos

CNPq, FAPEMIG, CAPES e INCTAA.