

Estudos da cinética de decomposição térmica do ácido algínico e os produtos de reação com as etanolaminas.

Rita de Cássia da Silva (PG) e Éder Tadeu Gomes Cavalheiro* (PQ)

1 – Universidade de São Paulo – Instituto de Química de São Carlos

*cavalheiro@iqsc.usp.br

Palavras Chave: alginato, fator pré-exponencial, energia de ativação, etanolaminas

Introdução

A determinação de parâmetros cinéticos, a partir de dados de Termogravimetria, teve origem no estudo cinético de decomposição de polímeros. O princípio da avaliação cinética de um processo por Termogravimetria é que a variação de massa seja uma função da velocidade de decomposição térmica.

O ácido algínico (Halg) é um polissacarídeo natural, extraído de uma classe de algas marrons conhecidas como *Phaeophyceae*. É usado em grande escala na indústria alimentícia, na indústria farmacêutica e de bebidas. As etanolaminas também podem ser utilizadas na formulação de produtos farmacêuticos.

Deste modo, o objetivo deste trabalho foi determinar a energia de ativação e o fator pré-exponencial de Arrhenius referentes à cinética de decomposição térmica dos produtos de reação entre o Halg e as ETA's.

Resultados e Discussão

Foram selecionados intervalos de temperatura nas razões de aquecimento de 2,5; 5,0; 10 e 15°C e, a partir deles, obtiveram-se os valores de E_a e $\log A$, associados aos eventos térmicos sob análise.

Estes intervalos estão representados na Tabela 6 juntamente com as perdas de massa correspondentes.

Tabela 1. Valores obtidos a partir das curvas TG em diferentes razões de aquecimento (β), com intervalos de temperatura (T) e perda de massa (%) para o cálculo de E_a e $\log A$

Limites de reação			Halg	MEA	DEA	TEA
$\beta / ^\circ\text{C min}^{-1}$	$T_0 / ^\circ\text{C}$	$T_i / ^\circ\text{C}$	$\Delta m / \%$	$\Delta m / \%$	$\Delta m / \%$	$\Delta m / \%$
2,5	120	285	11,30	10,07	10,90	6,78
5,0	120	295	11,22	10,76	11,19	6,96
10	120	300	11,25	10,33	11,22	6,89
15	125	310	11,34	10,78	11,26	4,72

A seleção adequada das frações conversionais nas curvas TG, para cada uma das reações envolvidas permite obter o gráfico de $\log \beta$ em função de $1000/T$, que resultam em retas cujos pontos correspondem à razão de aquecimento e à respectiva temperatura de decomposição térmica

em determinado valor de α . A partir disto são calculados a energia de ativação, E_a e o fator pré-exponencial, $\log A$.

As variações de energia de ativação em função da fração de conversão de massa (α) apresentam perfis semelhantes entre o Halg e o produto de reação com a DEA. Os produtos de reação com TEA e com a MEA apresentam comportamentos próprios.

Na Figura 1 é possível acompanhar a variação da energia de ativação com a fração conversional do início até o final do intervalo estudado para o Halg e os seus produtos de reação com as ETA's. Neste tipo de gráfico a variação na forma da curva sugere mudança de mecanismo de reação.

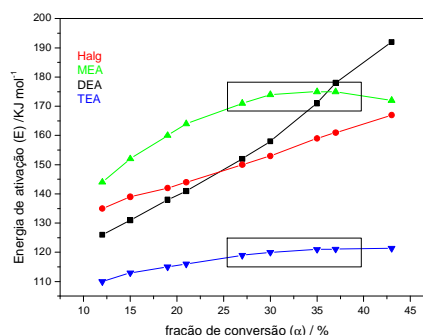


Figura 1. Relação entre energia de ativação e fração conversional de Halg durante o primeiro processo de decomposição térmica.

Conclusões

Tomando o intervalo de 25 – 40% para todas as amostras obtém-se os seguintes valores médios de E_a : Halg; $155,6 \text{ kJ mol}^{-1} \pm 11$; MEA-produto: $173,8 \text{ kJ mol}^{-1} \pm 22$; DEA-produto: $164,6 \text{ kJ mol}^{-1} \pm 11$ e TEA-produto: $120,3 \text{ kJ mol}^{-1} \pm 4$.

Os perfis sugerem que, de fato, há alterações estruturais causadas pela reação do Halg com as ETA's. A ordem destas energias de ativação sugere ligações mais fortes na ordem: MEA-produto > DEA-produto > Halg > TEA-produto

Agradecimentos

Os autores agradecem a Capes, a CNPq e a Fapesp (06/06633-1) pelo auxílio financeiro.