

Estudo de parâmetros do processo de intercalação de etilenodiamina em vermiculita utilizando quimiometria.

Líbia N. F. de Queiroga (PG), Maria G. da Fonseca* (PQ), Fernando J. V. E. de Oliveira (PQ), Patricia K. Soares (PQ)

Departamento de Química, CCEN, Universidade Federal da Paraíba. *mgardennia@quimica.ufpb.br

Palavras Chave: *lixiviação, vermiculita, etilenodiamina, métodos quimiométricos*

Introdução

Alguns minerais argilosos apresentam estruturas lamelares que permitem modificações químicas através de reações de intercalação de moléculas orgânicas ou troca de cátions originalmente presentes no espaço interlamelar. A vermiculita é um desses minerais e pode apresentar diferenças na capacidade de intercalação de acordo com as condições das reações. Por isso, é relevante o estudo dos parâmetros experimentais envolvidos no processo, para que uma condição ótima seja encontrada e permita o máximo aproveitamento do material em uma dada aplicação. Este trabalho tem como objetivo analisar os espectros na região do infravermelho para discriminar amostras preparadas em diferentes condições empregando métodos quimiométricos.

Foram preparadas 16 amostras com base em um planejamento fatorial 2^4 , investigando os fatores concentração (C) de etilenodiamina (en), temperatura (T), tempo de reação (t) e lixiviação do sólido (L). A Tabela 1 mostra os níveis dos fatores avaliados.

Tabela 1. Dados do experimento.

Fatores	Níveis	
	-1 (baixo)	+1 (alto)
C (mol L ⁻¹)	0,1	0,2
T (°C)	30	50
t (h)	24	48
L	Não	Sim

Resultados e Discussão

Para a análise de componentes principais (PCA) e análise hierárquica de agrupamentos (HCA) os dados foram dispostos numa matriz contendo 16 amostras e 1868 variáveis, que correspondem ao intervalo de número de onda de 4000 a 400 cm⁻¹. A PCA permitiu discriminar as amostras com três componentes principais que juntas explicam 91,84% da variância dos dados.

A componente principal 1 (CP1) discriminou claramente as amostras não-lixiviadas (1 a 8) das lixiviadas (9 a 16). As variáveis que separam os dois grupos possuem absorção na região do IV em 3462, 1022, 1087 e 993 cm⁻¹. A CP2 separa as amostras não-lixiviadas com relação à concentração de en intercalada. As variáveis que influenciam essa discrepância entre as amostras possuem absorção em 3741, 3427, 1512 e 806 cm⁻¹. A CP3 separa as amostras 9 (---+) da amostra 11 (-++), que diferem com relação ao nível do fator temperatura. A HCA permite observar os mesmos agrupamentos observados na PCA, conforme mostra o dendrograma da Figura 1.

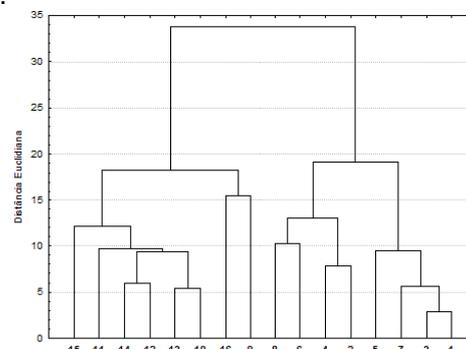


Figura 1. Dendrograma baseado nos espectros IV das 16 amostras.

Conclusões

A PCA e HCA dos espectros de infravermelho das 16 amostras estudadas permitiu concluir que todos os fatores investigados influenciam na capacidade de intercalação da vermiculita.

Agradecimentos

CAPES e CNPq pelo auxílio financeiro.

¹Temuujin, J.; Okada, K. e MacKenzie, K. J.D. *Appl. Clay Sci.* 22. 2003,187-195.