

Desvendando os mecanismos de adsorção de diclofenaco sob maghemita ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$): Evidências teóricas e experimentais

VICTOR LEONE DE OLIVEIRA (Colaborador), Teodorico de Castro Ramalho (Colaborador), Adilson Candido da Silva (Orientador)

Este estudo teve por objetivo entender os mecanismos envolvidos na adsorção de diclofenaco em água usando maghemita como adsorvente. Estes resultados são inéditos para esta fase de ferro. A área específica foi determinada usando adsorção/dessorção de N_2 e os dados ajustados usando a equação BET, mostrando que a maghemita apresenta área de $79 \text{ m}^2/\text{g}$. As caracterizações por espectroscopia Mössbauer do ^{57}Fe e difração de raios-X confirmaram que a fase formada é maghemita. Primeiramente foi realizada uma cinética de adsorção a temperatura ambiente e em $\text{pH} = 7.0$. Nestas condições a adsorção máxima obtida foi de 252 mg/g . Os dados cinéticos se ajustaram ao modelo de pseudo-segunda ordem, sugerindo a ocorrência de adsorção química. Foram realizadas isotermas de adsorção em temperaturas de 15°C , 25°C , 35°C e 45°C . Os dados mostram que a adsorção máxima obtida é de 252 mg/g , corroborando dados cinéticos. Os cálculos termodinâmicos obtidos mostram uma entalpia de adsorção de $134,2 \text{ KJ}$, novamente indicando a formação de ligações químicas. Testes cinéticos em diferentes pH revelam que a quantidade máxima de adsorção decai com o aumento do pH. Experimentos de dessorção mostraram que em pH básico ocorre dessorção de diclofenaco na superfície da maghemita. Durante o teste para análise do PCZ, notou-se que o adsorvente possui grande capacidade de acidificar água destilada. Cálculos computacionais indicaram que a distância teórica de ligação (700 pm) de menor energia de ligação, é mais favorável, quando o arranjo espacial do diclofenaco direciona o seu sítio desprotonado (do grupo carboxílico $-\text{COO}-$) para a superfície do adsorvente. De acordo com os mapas de densidade, os sítios preferenciais de ligação se encontram no átomo de Fe. Assim, propôs-se o mecanismo no qual o diclofenaco se adsorve no grupos Fe-OH_2 presentes na superfície da maghemita através do grupo carboxílico ($-\text{COO}-$). Espera-se com este estudo contribuir para elucidar o mecanismo de adsorção de diclofenaco sob maghemita.

Instituição de Ensino: Universidade Federal de Ouro Preto