

Utilização de métodos de RMN no estado sólido para caracterização de íons contidos em ambientes porosos.

Paulo C. M. Correa (PG)^{1*}, Daniel F. Cipriano¹ (PQ), Miguel Ângelo S. Junior¹ (PQ), Jair C.C Freitas (PQ)¹.

paulo.correa@edu.ufes.br

¹Laboratório de Materiais Carbonosos e Cerâmicos, Departamento de Física, Universidade Federal do Espírito Santo, Av. Fernando Ferrari, 514, CEP 29075-970, Vitória-ES.

Palavras Chave: RMN, NICS, meios porosos, carvão ativado.

Introdução

Carvões ativados (CAs) possuem aplicações em supercapacitores, catálise e processos de tratamento de água, entre outros^{1,2}. No entanto, aspectos químicos e dinâmicos da interação entre íons em solução e a superfície dos CAs não são completamente compreendidos¹. A espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN) é uma técnica eficaz para a investigação de íons em solução confinados em ambientes porosos.¹ O principal fenômeno observado é o *nucleus-independent chemical shift* (NICS), causado por correntes de elétrons π em domínios grafênicos, gerando efeitos de blindagem magnética sobre espécies nucleares em suas proximidades. A magnitude do NICS diminui com o aumento da distância entre o núcleo sonda e o plano grafênico, podendo ser usada para caracterização química e estrutural de CAs¹. Assim, este trabalho visa obter informações estruturais de CAs comerciais e derivados de biomassa, por meio da medida do NICS e análise de espectros de RMN de diferentes núcleos sondas.

Resultados e Discussão

Foram utilizados CAs obtidos a partir do endocarpo de babaçu (nomeados como B240, B400, B650 e B730) e uma amostra comercial (nomeada AC820); os números em cada nome indicam o valor da área superficial específica, em m²/g. As Figuras 1a) e 1b) mostram os espectros de RMN de ¹⁹F e ¹H, respectivamente, obtidos para os diferentes CAs impregnados com uma solução aquosa 1,0 M de NaBF₄. Observam-se dois picos: em altas frequências (pico “ex-poro”), que correspondem aos íons e moléculas de água fora dos poros e em baixas frequências (pico “in-poro”), que referem-se aos mesmos núcleos confinados na rede porosa dos CAs. Estes resultados sugerem que os CAs B240 e B400 possuem poros que dificultam a entrada do íon BF₄⁻, mas são acessíveis às moléculas de água. O NICS observado para as amostras B650 e B730 indicam que, na rede porosa dos CAs de biomassa, as moléculas de água ficam mais próximas à superfície do que os íons BF₄⁻ em solução.

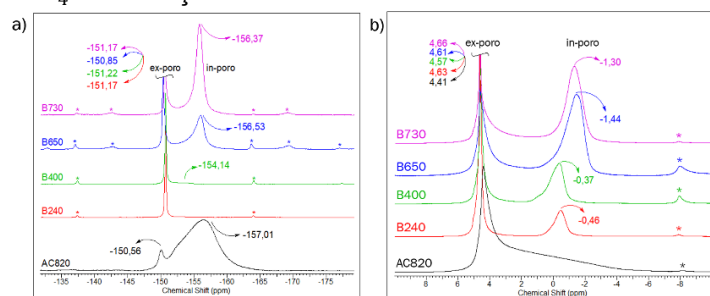


Figura 1. Espectros de RMN de a) ¹⁹F e b) ¹H dos CAs impregnados com 50 μ L de uma solução aquosa 1,0 M de NaBF₄.

Conclusões

Experimentos de RMN utilizando CAs impregnados com soluções aquosas iônicas mostrou ser possível obter valores de NICS diretamente dos espectros para diferentes núcleos sondas. A análise de espectros de RMN de ¹⁹F e ¹H de CAs impregnados com uma solução aquosa de NaBF₄ permitiu a obtenção de informações sobre a estrutura porosa dos CAs e das suas interações com os íons em solução.

Agradecimentos

CAPES, FAPES, CNPq, LabPetro, UFES.

¹Cervini, L.; Lynes, O. D.; Akien, G. R.; Kerridge, A.; Barrow, N. S. e Griffin, J. M. *Energy Storage Materials*, 21, 335-346.

²Şahin, M. E.; Blaabjerg, F.; e Sangwongwanich, A. *Energies*, 15, 674.