

Estudo da distribuição de CO_2 e derivados protonados na superfície molecular aquosa em função de sua acidez.

G. Moura^{*1}, A. H. A. Gomes^{*}, V. Ekholm[†], I. Unger[†], C. Saak[†], O. Björneholm[†], A. Naves de Brito^{*2}

^{*} Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, São Paulo, Brasil.

[†] Departamento de Física e Astronomia, Universidade de Uppsala, Uppsala, Suécia.

Synopsis Estudar a distribuição de espécies protonadas do CO_2 na superfície aquosa e no interior do líquido para diferentes pHs e comparar os resultados encontrados nos dois casos.

Os aerossóis atmosféricos possuem um papel importante para a determinação de previsões climáticas. Devido ao seu pequeno tamanho, a razão de átomos presentes na superfície é maior que no corpo do líquido, e desta forma sofrem mais influência dos fenômenos em escala molecular na interface líquido-gás. Melhorar a compreensão dos processos que ocorrem na superfície aquosa é importante para entendermos o impacto dos aerossóis nas previsões climáticas. O CO_2 tem sido encontrado em concentrações cada vez maiores na atmosfera. Sua presença pode inclusive afetar o pH dos oceanos com consequências drásticas para a vida marinha.

O CO_2 quando dissolvido em meio aquoso possui espécies protonadas como ácido carbônico (H_2CO_3), bicarbonato (HCO_3^-) e o carbonato (CO_3^{2-}), dependendo da acidez do meio. O objetivo deste estudo é entender a distribuição destas espécies na superfície molecular e compará-la com aquela encontrada no interior do líquido.

Usando a técnica de microjato [1] foi realizado um experimento de Espectroscopia de Fotoemissão no Max-lab, administrado pela Universidade de Lund, Suécia, com cinco amostras de bicarbonato de sódio 5 mol/L diluídas em água com diferentes pHs (7.0, 8.8, 9.8, 10.8 e 12.4). Esta técnica de espectroscopia é sensível a superfície e a espécie química. A partir deste estudo encontramos claras diferenças das concentrações das espécies protonadas quando comparado com o que seria esperado para o corpo do líquido que é dado pela equação de Henderson-Hasselbach.

Para confirmar este resultado também foi realizado um experimento de Ressonância Magnética Nuclear [2], com as mesmas cinco amostras do experimento anterior, no Laboratório Nacional de Biociências (LNBio), em Campinas. Esta espectroscopia de ressonância é sensível ao corpo do líquido, e, portanto, encontramos a distribuição das duas espécies nesta

região.

Na figura 1 encontra-se a comparação entre os resultados e as curvas teóricas obtidas com os dois experimentos. Nesta figura observamos a variação da concentração das espécies de HCO_3^- e CO_3^{2-} em relação ao pH. O pK_a encontrado para a desprotonação no corpo do líquido é 10.13, o que é esperado pela literatura [3]. Para a superfície, o ajuste dos dados foi realizado com a isoterma de Lagmuir. A partir deste ajuste é possível obter a variação da energia livre de Gibbs para cada uma das espécies, $\Delta G_{HCO_3^-} = -3,8 kJ/mol$ e $\Delta G_{CO_3^{2-}} = -1,4 kJ/mol$. Encontramos dois pK_a a partir deste ajuste com a isoterma, $pK_{a_{HCO_3^-}} = 9,7$ e $pK_{a_{CO_3^{2-}}} = 11,9$.

Este estudo pode ajudar a melhor entender os modelos de absorção de CO_2 em meios aquosos.

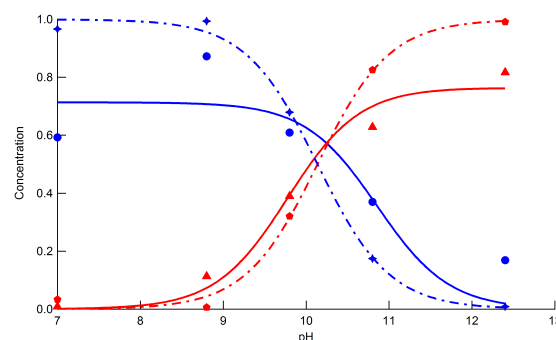


Figure 1. Comparação dos experimentos. A linha cheia representa concentração na superfície e a linha pontilhada a concentração no corpo do líquido.

Referências

- [1] B. Winter *et al* 2006 *Chemical Reviews*
- [2] S. Moret, P. J. Dyson, G. Laurency *et al* 2013 *Dalton Transactions*
- [3] A. H. England, A. M. Duffin, C. P. Schwartz *et al* 2011 *Chemical Physics Letters*

¹E-mail: gabrielamourars@gmail.com

²E-mail: arnaldo.naves@gmail.com