

XXVI CONGRESSO

SIBAE 19-23 Maio 2024
Lisboa, Portugal

LIVRO DE RESUMOS
2024

Desvendando mecanismos eletroquímicos: identificação de radicais e intermediários na oxidação de contaminantes em meio alcoólico

William Santacruz¹, Júlia Faria¹, Otaciro R. Nascimento², Artur J. Motheo¹

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

²Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

e-mail: artur@iqsc.usp.br

Os processos eletroquímicos têm sido extensivamente investigados como técnicas eficazes no tratamento de águas residuais, envolvendo a geração de diversas espécies reativas capazes de degradar diversos tipos de contaminantes. A formação dessas espécies é influenciada por vários fatores, incluindo o material do eletrodo, o pH da solução, o eletrólito de suporte, a densidade de corrente aplicada, entre outros. Compreender que a oxidação de contaminantes orgânicos resulta na formação de diversos subprodutos de oxidação é crucial, pois esses subprodutos variam de acordo com o mecanismo de oxidação e as espécies reativas formadas em solução. A identificação desses mecanismos e espécies é fundamental para propor estratégias de degradação e elucidar intermediários e subprodutos gerados durante o processo eletroquímico [1,2].

Neste estudo, utilizou-se a Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) em conjunto com a técnica de spin trapping utilizando 5,5-Dimetil-1-pirrolina N-óxido (DMPO) para detectar as espécies radicalares formadas durante a oxidação eletroquímica em meio de metanol. Observou-se uma diferença significativa nas espécies reativas formadas na presença de cloreto ou sulfato no meio (**Figura 1**). Em meio de cloreto de sódio, espécies como $\cdot\text{Cl}$, $\cdot\text{CR}$, $\cdot\text{OR}$ foram identificadas e confirmadas por simulações. Já em meio ácido sulfúrico, foram observadas as mesmas espécies, adicionando-se o possível radical $\cdot\text{SO}_4$. A formação dessas espécies mostrou depender do tipo de ânodo utilizado, destacando as diferenças entre um ânodo ativo e um não ativo. Finalmente, a cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massas (LC-MS) foi empregada para detectar as massas dos adutos formados e identificar os radicais adicionados no DMPO. Esse método permitiu uma caracterização mais detalhada dos produtos formados durante a oxidação eletroquímica em meio de metanol, fornecendo insights valiosos para futuras estratégias de tratamento de águas residuais contaminadas.

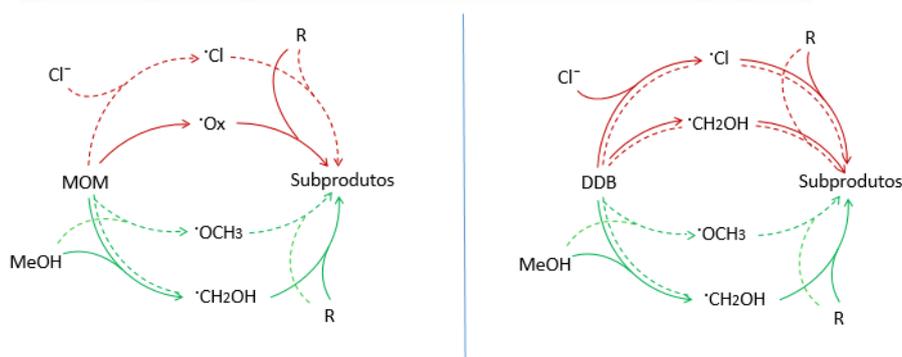


Figura 1. Possível mecanismo de oxidação usando um eletrodo ativo de mistura de óxidos metálicos (MOM) e de diamante dopado com boro (DDB) em meio de metanol contendo cloreto de sódio (vermelho) e ácido sulfúrico (verde).

Referências

- [1] S. O. Ganiyu, C.A. Martínez-Huitle, M.A. Oturan. *Curr. Opin. Electrochem.*, 27 (2021) 100678.
[2] R. Fu, P. Zhang, Y. Jiang, L. Sun, X. Sun. *Chemosphere*, 311 (2023) 136993.