



# Ciências Exatas e da Terra: Conhecimentos Estratégicos para o Desenvolvimento do País

Júlio César Ribeiro  
(Organizador)

**Atena**  
Editora  
Ano 2020



# Ciências Exatas e da Terra: Conhecimentos Estratégicos para o Desenvolvimento do País

Júlio César Ribeiro  
(Organizador)

**Atena**  
Editora  
Ano 2020

2020 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do Texto © 2020 Os autores

Copyright da Edição © 2020 Atena Editora

**Editora Chefe:** Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

**Diagramação:** Karine de Lima

**Edição de Arte:** Lorena Prestes

**Revisão:** Os Autores



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição *Creative Commons*. Atribuição 4.0 Internacional (CC BY 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores. Permitido o download da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

### **Conselho Editorial**

#### **Ciências Humanas e Sociais Aplicadas**

Profª Drª Adriana Demite Stephani – Universidade Federal do Tocantins

Prof. Dr. Álvaro Augusto de Borba Barreto – Universidade Federal de Pelotas

Prof. Dr. Alexandre Jose Schumacher – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Mato Grosso

Profª Drª Angeli Rose do Nascimento – Universidade Federal do Estado do Rio de Janeiro

Prof. Dr. Antonio Carlos Frasson – Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Prof. Dr. Antonio Gasparetto Júnior – Instituto Federal do Sudeste de Minas Gerais

Prof. Dr. Antonio Isidro-Filho – Universidade de Brasília

Prof. Dr. Carlos Antonio de Souza Moraes – Universidade Federal Fluminense

Profª Drª Cristina Gaio – Universidade de Lisboa

Profª Drª Denise Rocha – Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. Deyvison de Lima Oliveira – Universidade Federal de Rondônia

Prof. Dr. Edvaldo Antunes de Farias – Universidade Estácio de Sá

Prof. Dr. Eloi Martins Senhora – Universidade Federal de Roraima

Prof. Dr. Fabiano Tadeu Grazioli – Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões

Prof. Dr. Gilmei Fleck – Universidade Estadual do Oeste do Paraná

Prof. Dr. Gustavo Henrique Cepolini Ferreira – Universidade Estadual de Montes Claros

Profª Drª Ivone Goulart Lopes – Istituto Internazionele delle Figlie de Maria Ausiliatrice

Prof. Dr. Julio Candido de Meirelles Junior – Universidade Federal Fluminense

Profª Drª Keyla Christina Almeida Portela – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Mato Grosso

Profª Drª Lina Maria Gonçalves – Universidade Federal do Tocantins

Prof. Dr. Luis Ricardo Fernandes da Costa – Universidade Estadual de Montes Claros

Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte

Prof. Dr. Marcelo Pereira da Silva – Universidade Federal do Maranhão

Profª Drª Miranilde Oliveira Neves – Instituto de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará

Profª Drª Paola Andressa Scortegagna – Universidade Estadual de Ponta Grossa

Profª Drª Rita de Cássia da Silva Oliveira – Universidade Estadual de Ponta Grossa

Profª Drª Sandra Regina Gardacho Pietrobon – Universidade Estadual do Centro-Oeste

Profª Drª Sheila Marta Carregosa Rocha – Universidade do Estado da Bahia

Prof. Dr. Rui Maia Diamantino – Universidade Salvador

Prof. Dr. Urandi João Rodrigues Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará

Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande

Prof. Dr. William Cleber Domingues Silva – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
Prof. Dr. Willian Douglas Guilherme – Universidade Federal do Tocantins

### **Ciências Agrárias e Multidisciplinar**

Prof. Dr. Alexandre Igor Azevedo Pereira – Instituto Federal Goiano  
Prof. Dr. Antonio Pasqualetto – Pontifícia Universidade Católica de Goiás  
Prof. Dr. Cleberton Correia Santos – Universidade Federal da Grande Dourados  
Profª Drª Daiane Garabeli Trojan – Universidade Norte do Paraná  
Profª Drª Diocléa Almeida Seabra Silva – Universidade Federal Rural da Amazônia  
Prof. Dr. Écio Souza Diniz – Universidade Federal de Viçosa  
Prof. Dr. Fábio Steiner – Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul  
Prof. Dr. Fágner Cavalcante Patrocínio dos Santos – Universidade Federal do Ceará  
Profª Drª Girlene Santos de Souza – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia  
Prof. Dr. Júlio César Ribeiro – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
Profª Drª Lina Raquel Santos Araújo – Universidade Estadual do Ceará  
Prof. Dr. Pedro Manuel Villa – Universidade Federal de Viçosa  
Profª Drª Raissa Rachel Salustriano da Silva Matos – Universidade Federal do Maranhão  
Prof. Dr. Ronilson Freitas de Souza – Universidade do Estado do Pará  
Profª Drª Talita de Santos Matos – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
Prof. Dr. Tiago da Silva Teófilo – Universidade Federal Rural do Semi-Árido  
Prof. Dr. Valdemar Antonio Paffaro Junior – Universidade Federal de Alfenas

### **Ciências Biológicas e da Saúde**

Prof. Dr. André Ribeiro da Silva – Universidade de Brasília  
Profª Drª Anelise Levay Murari – Universidade Federal de Pelotas  
Prof. Dr. Benedito Rodrigues da Silva Neto – Universidade Federal de Goiás  
Prof. Dr. Edson da Silva – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri  
Profª Drª Eleuza Rodrigues Machado – Faculdade Anhanguera de Brasília  
Profª Drª Elane Schwinden Prudêncio – Universidade Federal de Santa Catarina  
Profª Drª Eysler Gonçalves Maia Brasil – Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira  
Prof. Dr. Ferlando Lima Santos – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia  
Prof. Dr. Fernando José Guedes da Silva Júnior – Universidade Federal do Piauí  
Profª Drª Gabriela Vieira do Amaral – Universidade de Vassouras  
Prof. Dr. Gianfábio Pimentel Franco – Universidade Federal de Santa Maria  
Profª Drª Iara Lúcia Tescarollo – Universidade São Francisco  
Prof. Dr. Igor Luiz Vieira de Lima Santos – Universidade Federal de Campina Grande  
Prof. Dr. José Max Barbosa de Oliveira Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará  
Prof. Dr. Luís Paulo Souza e Souza – Universidade Federal do Amazonas  
Profª Drª Magnólia de Araújo Campos – Universidade Federal de Campina Grande  
Prof. Dr. Marcus Fernando da Silva Praxedes – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia  
Profª Drª Mylena Andréa Oliveira Torres – Universidade Ceuma  
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federaci do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Paulo Inada – Universidade Estadual de Maringá  
Profª Drª Renata Mendes de Freitas – Universidade Federal de Juiz de Fora  
Profª Drª Vanessa Lima Gonçalves – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande

### **Ciências Exatas e da Terra e Engenharias**

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto

Prof. Dr. Alexandre Leite dos Santos Silva – Universidade Federal do Piauí  
Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná  
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará  
Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas – Universidade Federal de Campina Grande  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Marcelo Marques – Universidade Estadual de Maringá  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista

### **Conselho Técnico Científico**

Prof. Me. Abrãao Carvalho Nogueira – Universidade Federal do Espírito Santo  
Prof. Me. Adalberto Zorzo – Centro Estadual de Educação Tecnológica Paula Souza  
Prof. Me. Adalto Moreira Braz – Universidade Federal de Goiás  
Prof. Dr. Adaylson Wagner Sousa de Vasconcelos – Ordem dos Advogados do Brasil/Seccional Paraíba  
Prof. Me. André Flávio Gonçalves Silva – Universidade Federal do Maranhão  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Andreza Lopes – Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento Acadêmico  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Andrezza Miguel da Silva – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia  
Prof. Dr. Antonio Hot Pereira de Faria – Polícia Militar de Minas Gerais  
Prof<sup>a</sup> Ma. Bianca Camargo Martins – UniCesumar  
Prof<sup>a</sup> Ma. Carolina Shimomura Nanya – Universidade Federal de São Carlos  
Prof. Me. Carlos Antônio dos Santos – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
Prof. Ma. Cláudia de Araújo Marques – Faculdade de Música do Espírito Santo  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Cláudia Taís Siqueira Cagliari – Centro Universitário Dinâmica das Cataratas  
Prof. Me. Daniel da Silva Miranda – Universidade Federal do Pará  
Prof<sup>a</sup> Ma. Daniela da Silva Rodrigues – Universidade de Brasília  
Prof<sup>a</sup> Ma. Dayane de Melo Barros – Universidade Federal de Pernambuco  
Prof. Me. Douglas Santos Mezacas – Universidade Estadual de Goiás  
Prof. Dr. Edwaldo Costa – Marinha do Brasil  
Prof. Me. Eduardo Gomes de Oliveira – Faculdades Unificadas Doctum de Cataguases  
Prof. Me. Eliel Constantino da Silva – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita  
Prof. Me. Euvaldo de Sousa Costa Junior – Prefeitura Municipal de São João do Piauí  
Prof<sup>a</sup> Ma. Fabiana Coelho Couto Rocha Corrêa – Centro Universitário Estácio Juiz de Fora  
Prof. Dr. Fabiano Lemos Pereira – Prefeitura Municipal de Macaé  
Prof. Me. Felipe da Costa Negrão – Universidade Federal do Amazonas  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Germana Ponce de Leon Ramírez – Centro Universitário Adventista de São Paulo  
Prof. Me. Gevair Campos – Instituto Mineiro de Agropecuária  
Prof. Dr. Guilherme Renato Gomes – Universidade Norte do Paraná  
Prof. Me. Gustavo Krahl – Universidade do Oeste de Santa Catarina  
Prof. Me. Helton Rangel Coutinho Junior – Tribunal de Justiça do Estado do Rio de Janeiro  
Prof<sup>a</sup> Ma. Jaqueline Oliveira Rezende – Universidade Federal de Uberlândia  
Prof. Me. Javier Antonio Albornoz – University of Miami and Miami Dade College  
Prof<sup>a</sup> Ma. Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho  
Prof. Me. Jhonatan da Silva Lima – Universidade Federal do Pará  
Prof. Me. José Luiz Leonardo de Araujo Pimenta – Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria Uruguay  
Prof. Me. José Messias Ribeiro Júnior – Instituto Federal de Educação Tecnológica de Pernambuco

Profª Ma. Juliana Thaisa Rodrigues Pacheco – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
 Profª Drª Kamilly Souza do Vale – Núcleo de Pesquisas Fenomenológicas/UFPA  
 Profª Drª Karina de Araújo Dias – Prefeitura Municipal de Florianópolis  
 Prof. Dr. Lázaro Castro Silva Nascimento – Laboratório de Fenomenologia & Subjetividade/UFPR  
 Prof. Me. Leonardo Tullio – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
 Profª Ma. Lilian Coelho de Freitas – Instituto Federal do Pará  
 Profª Ma. Liliani Aparecida Sereno Fontes de Medeiros – Consórcio CEDERJ  
 Profª Drª Lívia do Carmo Silva – Universidade Federal de Goiás  
 Prof. Me. Lucio Marques Vieira Souza – Secretaria de Estado da Educação, do Esporte e da Cultura de Sergipe  
 Prof. Me. Luis Henrique Almeida Castro – Universidade Federal da Grande Dourados  
 Prof. Dr. Luan Vinicius Bernardelli – Universidade Estadual do Paraná  
 Prof. Dr. Michel da Costa – Universidade Metropolitana de Santos  
 Prof. Dr. Marcelo Máximo Purificação – Fundação Integrada Municipal de Ensino Superior  
 Prof. Me. Marcos Aurelio Alves e Silva – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo  
 Profª Ma. Marileila Marques Toledo – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri  
 Prof. Me. Ricardo Sérgio da Silva – Universidade Federal de Pernambuco  
 Prof. Me. Rafael Henrique Silva – Hospital Universitário da Universidade Federal da Grande Dourados  
 Profª Ma. Renata Luciane Polsaque Young Blood – UniSecal  
 Profª Ma. Solange Aparecida de Souza Monteiro – Instituto Federal de São Paulo  
 Prof. Me. Tallys Newton Fernandes de Matos – Faculdade Regional Jaguaribana  
 Prof. Dr. Welleson Feitosa Gazel – Universidade Paulista

<b>Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) (eDOC BRASIL, Belo Horizonte/MG)</b>	
C569	<p>Ciências exatas e da terra [recurso eletrônico] : conhecimentos estratégicos para o desenvolvimento do país / Organizador Júlio César Ribeiro. – Ponta Grossa, PR: Atena, 2020.</p> <p>Formato: PDF            Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader            Modo de acesso: World Wide Web            Inclui bibliografia            ISBN 978-65-5706-160-2            DOI 10.22533/at.ed.602200207</p> <p>1. Ciências exatas e da terra – Pesquisa – Brasil. 2. Tecnologia e inovação. I. Ribeiro, Júlio César.</p> <p style="text-align: right;">CDD 500</p>
<b>Elaborado por Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422</b>	

Atena Editora  
 Ponta Grossa – Paraná - Brasil  
[www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)  
 contato@atenaeditora.com.br

## APRESENTAÇÃO

O desenvolvimento socioeconômico do País está assentado primordialmente na inovação baseada no seu desenvolvimento científico e tecnológico.

É notado, principalmente nos últimos anos, que há grande necessidade de fortalecimento e expansão da capacidade de pesquisa e de inovação, bem como o aprimoramento dos conhecimentos já adquiridos pela sociedade.

Neste contexto, o E-book “Ciências Exatas e da Terra: Conhecimentos Estratégicos para o Desenvolvimento do País” foi composto por uma coletânea de trabalhos relacionados às Ciências Exatas e da Terra que contemplam os mais variados temas ligados ao desenvolvimento.

Os 20 capítulos que constituem a presente obra, elaborados por pesquisadores de diversas instituições de pesquisa, permitem aos leitores analisar e discutir assuntos tais como: importância das ondas eletromagnéticas e transmissão na camada da ionosfera, produção de filmes de polímeros a partir de diferentes complexos para aplicação em células solares, estudo de diferentes metodologias na caracterização de material polimérico, utilização de modelagem numérica na investigação da dispersão de plumas poluentes, aplicação de malhas computacionais para a verificação do transporte de doenças de plantas pelo ar, dentre outros assuntos de relevância para as Ciências Exatas e da Terra.

O organizador e a Atena Editora agradecem aos autores e instituições envolvidas nos trabalhos que compõe a presente obra.

Por fim, esperamos que este E-book possa proporcionar reflexões significativas que contribuam para o aprimoramento do conhecimento e desenvolvimento de novas pesquisas.

Boa leitura!

Júlio César Ribeiro

## SUMÁRIO

### **CAPÍTULO 1 ..... 1**

ANÁLISE DAS ORIENTAÇÕES DE COMO DEMARCAR A IMAGINÁRIA LINHA DE PREAMAR MÉDIA DE 1831

Flavio Boscatto  
Cesar Rogério Cabral  
Everton da Silva

**DOI 10.22533/at.ed.6022002071**

### **CAPÍTULO 2 ..... 13**

NUMERICAL MODELING OF SEWAGE OUTFALLS PLUMES IN THE COAST OF THE STATE OF PARANÁ – BRAZIL

Paola Galluzzi Polesi  
Joseph Harari  
Tiago Cortez  
Samuel Hora Yang

**DOI 10.22533/at.ed.6022002072**

### **CAPÍTULO 3 ..... 30**

APLICAÇÃO DO MÉTODO GOD E ESTATÍSTICA MULTIVARIADA NO ESTUDO DA VULNERABILIDADE DE AQUÍFERO À CONTAMINAÇÃO EM ARACAJU/SE

José Batista Siqueira  
Thomaz Oliveira Teixeira  
Samiramisthaís Souza Linhares  
Luiz Alberto Vedana  
Paulo Henrique Stefano

**DOI 10.22533/at.ed.6022002073**

### **CAPÍTULO 4 ..... 43**

ANÁLISES DE GERAÇÃO DE MALHA NA MODELAGEM NUMÉRICA DE TROCADORES DE CALOR SOLO-AR

Michel Kepes Rodrigues  
Jairo Valões de Alencar Ramalho  
Ruth da Silva Brum  
Luiz Alberto Oliveira Rocha  
Elizaldo Domingues dos Santos  
Liércio André Isoldi

**DOI 10.22533/at.ed.6022002074**

### **CAPÍTULO 5 ..... 55**

AS ONDAS ELETROMAGNÉTICAS E APLICAÇÃO NA TRANSMISSÃO NA CAMADA DA IONOSFERA

José Augusto dos Santos Cardoso  
Wendel Correa dos Santos  
José Francisco da Silva Costa  
Antonio Maia de Jesus Chaves Neto  
Sebastião Gomes Silva  
Manuel de Jesus dos Santos Costa  
Alessandre Sampaio Silva

**DOI 10.22533/at.ed.6022002075**



**CAPÍTULO 6 ..... 76**

DECIFRANDO O ARCO-ÍRIS E O EFEITO GLÓRIA: UMA ABORDAGEM UTILIZANDO SISTEMAS DINÂMICOS

Janaína Dias da Silva  
Alberto Tufaile

**DOI 10.22533/at.ed.6022002076**

**CAPÍTULO 7 ..... 88**

MAGIC: INTERAÇÃO ENTRE HOBBY E LUCRO

Victor Ferreira da Silva  
Édipo Menezes da Silva  
Kelly Pereira de Lima  
João Domingos Scalon

**DOI 10.22533/at.ed.6022002077**

**CAPÍTULO 8 ..... 93**

A SOCIEDADE DA INFORMAÇÃO E O LIXO ELETRÔNICO: DESAFIOS, REFLEXÕES E OPORTUNIDADES

Fábio Henrique Angelo dos Santos  
Luana Maia Woida

**DOI 10.22533/at.ed.6022002078**

**CAPÍTULO 9 ..... 109**

APLICAÇÃO SIMULTÂNEA DE CALOR E MASSA NO PROCESSO DE SECAGEM DO ABIU

Nathalia Cristina Ramos Lima  
Jules Mitoura dos Santos Junior  
Emilio Émerson Xavier Guimarães Filho  
Ronaldo Maison Martins Costa  
Audirene Amorim Santana

**DOI 10.22533/at.ed.6022002079**

**CAPÍTULO 10 ..... 119**

BIOCONTROLE DO ÓLEO ESSENCIAL DE ORIGANUM VULGARE FRENTE ÀS LARVAS DE *Aedes aegypti* (DIPTERA: CULICIDAE)

Juliana de Sousa Figuerêdo  
Felipe Pereira da Silva Santos  
Matheus Oliveira do Nascimento  
Patrícia e Silva Alves  
Lucas Mendes Feitosa Dias  
Layana Karine Farias Lima  
Aline Aparecida Carvalho França  
Edymilaís da Silva Sousa  
Pedro Vitor Oliveira Silva Furtado  
Veruska Cavalcanti Barros  
José Luíz Silva Sá  
Chistiane Mendes Feitosa

**DOI 10.22533/at.ed.60220020710**

**CAPÍTULO 11 ..... 133**

COMPLEXOS B-DICETONATOS LUMINESCENTES BASEADOS EM ÍONS TERRAS RARAS DISPERSOS EM POLÍMEROS TRANSPARENTES PARA APLICAÇÕES EM CÉLULAS SOLARES

Gabriel de Moraes Rodrigues  
Ivan Guide Nunes da Silva  
Danilo Mustafa

**DOI 10.22533/at.ed.60220020711**

**CAPÍTULO 12 ..... 146**

SÍNTESE, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DAS PENEIRAS MOLECULARES: SBA-16, FDU-12, SBA-15 E MCM-41

Mayara Resende Alves  
Mateus Freitas Paiva  
Elon Ferreira de Freitas  
Sílvia Cláudia Loureiro Dias  
José Alves Dias

**DOI 10.22533/at.ed.60220020712**

**CAPÍTULO 13 ..... 160**

UMA EFICIENTE SÍNTESE DE DERIVADOS DE TRIARILMETANO

Shirley Muniz Machado Rodrigues  
Giovanni Stoppa Baviera  
Daniel Previdi  
Alexandre de Almeida Matias  
Paulo Marcos Donate

**DOI 10.22533/at.ed.60220020713**

**CAPÍTULO 14 ..... 170**

IDENTIFICAÇÃO NÃO INVASIVA DE MATERIAL POLIMÉRICO COM A TÉCNICA DE ESPECTROSCOPIA FTIR: BANCO DE DADOS DE REFERÊNCIA E APLICAÇÃO PRÁTICA

Fabício de Melo Rodrigues Barbosa  
Márcia de Almeida Rizzutto  
Wanda Gabriel Pereira Engel

**DOI 10.22533/at.ed.60220020714**

**CAPÍTULO 15 ..... 183**

SOLOS DO BRASIL: GÊNESE, CLASSIFICAÇÃO E LIMITAÇÕES AO USO

Carlos Roberto Pinheiro Junior  
Marcos Gervasio Pereira  
Eduardo Carvalho da Silva Neto  
Lúcia Helena Cunha dos Anjos  
Ademir Fontana

**DOI 10.22533/at.ed.60220020715**

**CAPÍTULO 16 ..... 200**

DETERMINAÇÃO DE HEXAZINONA EM AMOSTRAS DE SOLO POR ESPECTROFOTOMETRIA UV-VIS

Auriléia Pereira da Silva  
Lucina Rocha Sousa

**DOI 10.22533/at.ed.60220020716**

**CAPÍTULO 17 ..... 225**

GERAÇÃO DE MALHA PARA DESCREVER A DISPERSÃO DA FERRUGEM DA SOJA NO PARANÁ

Eduardo Oliveira Belinelli  
Paulo Laerte Natti  
Neyva Maria Lopes Romeiro  
Eliandro Rodrigues Cirilo  
Lucas Henrique Fantin  
Karla Braga de Oliveira  
Marcelo Giovanetti Canteri  
Érica Regina Takano Natti

**DOI 10.22533/at.ed.60220020717**

<b>CAPÍTULO 18</b> .....	<b>240</b>
ESTUDO DA ARTE SOBRE A UTILIZAÇÃO DO ÓLEO FÚSEL A PARTIR DA PRODUÇÃO DE ETANOL DA CANA-DE-AÇÚCAR	
Raquel Santos da Silva	
Danielle Christine Almeida Jaguaribe	
Joelma Morais Ferreira	
<b>DOI 10.22533/at.ed.60220020718</b>	
<b>CAPÍTULO 19</b> .....	<b>249</b>
FORMAS ASSOCIATIVISTAS DA COMUNIDADE QUILOMBOLA NOSSA SENHORA DO LIVRAMENTO, IGARAPÉ-AÇU/PA	
Jéssica Vasconcelos Ferreira	
Raiana Rocha Pereira	
Francisco Laurimar do Nascimento Andrade	
Fabiana Mar dos Santos	
Nayra Silva do Vale	
Luiz Cláudio Moreira Melo Júnior	
Eleci Teresinha Dias da Silva	
<b>DOI 10.22533/at.ed.60220020719</b>	
<b>CAPÍTULO 20</b> .....	<b>259</b>
ESTUDO DO EFEITO MEMÓRIA E FOTOLUMINESCÊNCIA EM HIDRÓXIDOS DUPLOS LAMELARES (HDL)	
Alexandre Candido Teixeira	
Alysson Ferreira Morais	
Ivan Guide Nunes da Silva	
Danilo Mustafa	
<b>DOI 10.22533/at.ed.60220020720</b>	
<b>SOBRE O ORGANIZADOR</b> .....	<b>273</b>
<b>ÍNDICE REMISSIVO</b> .....	<b>274</b>

## SÍNTESE, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DAS PENEIRAS MOLECULARES: SBA-16, FDU-12, SBA-15 E MCM-41

Data de aceite: 25/06/2020

### Mayara Resende Alves

Universidade de Brasília, Instituto de Química,  
Brasília – DF.

<http://lattes.cnpq.br/5855625148590212>

### Mateus Freitas Paiva

Universidade de Brasília, Instituto de Química,  
Brasília – DF.

<http://lattes.cnpq.br/8706613462389618>

### Elon Ferreira de Freitas

Universidade de Brasília, Instituto de Química,  
Brasília – DF.

<http://lattes.cnpq.br/8516075356145257>

### Sílvia Cláudia Loureiro Dias

Universidade de Brasília, Instituto de Química,  
Brasília – DF.

<http://lattes.cnpq.br/1333492927266447>

### José Alves Dias

Universidade de Brasília, Instituto de Química,  
Brasília – DF.

<http://lattes.cnpq.br/1255270110503523>

**RESUMO:** Sílicas mesoporosas ordenadas são de crescente interesse na pesquisa devido à variedade de aplicações destes materiais. Além do processo de síntese e caracterização desses materiais porosos o estudo da acidez está no topo do interesse para o conhecimento

de suas propriedades fundamentais. Assim, nesse trabalho quatro sílicas mesoporosas: SBA-16, FDU-12, SBA-15 e MCM-41 foram sintetizadas, caracterizadas estruturalmente por meio de FT-IR, adsorção/dessorção de N<sub>2</sub> a baixa temperatura (77 K), MET, MAS-RMN de <sup>29</sup>Si e investigadas quanto a acidez fazendo uso de TG/DTG para determinação da densidade total de silanóis, análise de calorimetria de adsorção em fase líquida e espectroscopia no infravermelho, ambas usando piridina como molécula sonda. Os resultados estruturais foram correlacionados com dados quantitativos termodinâmicos de acidez dos sítios mais fortes nos sólidos sintetizados, sendo possível determinar ao final do estudo a seguinte ordem de força: FDU-12 ( $\Delta H = -74,5 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) > MCM-41 ( $\Delta H = -68,3 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) > SBA-16 ( $\Delta H = -66,1 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) > SBA-15 ( $\Delta H = -39,0 \text{ kJ mol}^{-1}$ ). Além disso, uma importante discussão sobre a real disponibilidade de grupos ácidos silanóis presentes nas estruturas destes materiais foi elencada, sendo evidenciado que nem todos os sítios são acessíveis para a molécula sonda. Por fim, demonstrou-se que a natureza da acidez das sílicas mesoporosas está relacionada a sítios de ligação de hidrogênio presentes sobretudo nos poros dos materiais.

**PALAVRAS-CHAVE:** Sílicas mesoporosas, acidez, acessibilidade.

**ABSTRACT:** Ordered mesoporous silicas are of increasing attention in research because of their variety of applications. Besides the synthesis and characterization of these porous materials, the acidity study is at the top interest as a fundamental property. Thus, four mesoporous silicas: SBA-16, FDU-12, SBA-15 and MCM-41, were synthesized and structurally characterized by FT-IR,  $N_2$  adsorption/desorption at low temperature (77 K), TEM,  $^{29}Si$  MAS-NMR. The acidity was investigated using TG/DTG to determine the total density of silanols, liquid phase adsorption calorimetry analysis and infrared spectroscopy, both using pyridine as a probe molecule. The structural results were correlated to quantitative thermodynamic data of the acidity related to the strongest sites on the synthesized solids, making it possible to determine the following order of strength: FDU-12 ( $\Delta H = -74,5 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) > MCM-41 ( $\Delta H = -68,3 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) > SBA-16 ( $\Delta H = -66,1 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) > SBA-15 ( $\Delta H = -39,0 \text{ kJ mol}^{-1}$ ). In addition, an important discussion about the real availability of silanol acid groups present in the structures of these materials was pointed, showing that not all of them are accessible for the probe molecule. Finally, it was demonstrated that the nature of the acidity of the mesoporous silicas was related to hydrogen bonding sites present mainly in the pores of the materials.

**KEYWORDS:** Ordered mesoporous silica, acidity, accessibility.

### 1 | INTRODUÇÃO

Materiais com estrutura porosa ajustável sempre foram de grande interesse da indústria e da comunidade acadêmica. A aplicação de tais materiais requer a caracterização detalhada, bem como propriedades correspondentes para aplicações específicas.

Segundo definição da IUPAC, os materiais porosos são divididos em três classes: microporosos (tamanho de poro < 2 nm), mesoporosos (2 – 50 nm) e macroporosos (> 50nm). As sílicas mesoporosas ordenadas foram relatadas pela primeira vez em 1992. (PEREGO e MILLINI, 2013). Desde então, intensas pesquisas têm favorecido uma compreensão dos mecanismos de formação das fases mesoestruturadas e melhorado a descrição dos parâmetros sintéticos, levando a preparação de diferentes materiais para serem aplicados em diversas áreas do conhecimento científico e tecnológico como a catálise, petroquímica, farmacêutica e biomédica (TAGUCHI e SCHUTH, 2005).

Dentre as diversas estruturas sintetizadas, algumas mesoestruturas podem ser classificadas quanto aos tipos de poros: gaiola, canal cilíndrico e canal bi-contínuo. Por exemplo, SBA-16 e FDU-12 contêm poros tipo gaiola (grandes cavidades conectadas por entradas de poros multidirecionais de tamanhos menores), a MCM-41 e a SBA-15 têm canais cilíndricos dispostos hexagonalmente e a MCM-48 tem uma estrutura bi-contínua, com poros interconectados em sistema tridimensional (PEREGO e MILLINI, 2013; TAGUCHI e SCHUTH, 2005; MEOTO et al., 2017). Esses materiais apresentam as seguintes propriedades: elevada área específica, canal mesoporoso ajustável com estreita distribuição de tamanho, espessura da parede do poro controlável e superfície com propriedades modificáveis (PEREGO e

MILLINI, 2013; TAGUCHI e SCHUTH, 2005; MEOTO et al., 2017).

Embora tenham sido realizados progressos consideráveis na síntese e caracterização desses materiais porosos, o estudo da acidez de superfície das sílicas mesoporosas não está completamente consolidado na literatura, sendo essa uma propriedade fundamental para as suas aplicações.

Nesse trabalho, quatro sílicas mesoporosas foram sintetizadas seguindo os métodos de síntese protocolados na literatura. O objetivo foi correlacionar a estrutura com as propriedades ácidas e texturais das diferentes sílicas mesoporosas: SBA-16, FDU-12, SBA-15 e MCM-41. Em particular, o estudo da acidez servirá como guia na escolha de materiais apropriados para aplicações variadas. A acidez superficial das peneiras moleculares foi investigada por TG/DTG para determinação da densidade total de grupos silanóis, análise de calorimetria de adsorção em fase líquida e espectroscopia no infravermelho usando piridina como molécula sonda. As caracterizações estruturais foram realizadas por FT-IR, adsorção/dessorção de N<sub>2</sub> a baixa temperatura, RMN em estado sólido do núcleo de silício 29 e MET. Os resultados dessas caracterizações foram correlacionados com os dados termodinâmicos quantitativos de acidez dos sítios mais fortes nos sólidos sintetizados.

## 2 | PARTE EXPERIMENTAL

### 2.1 Preparação das sílicas mesoporosas

#### 2.1.1 Síntese da SBA-16

A amostra de SBA-16 foi preparada como descrito em (ZHAO et al, 1998; RAFAL, BOGNA e MIETEK, 2006): 2 g do copolímero tribloco Pluronic F127 foi adicionado a 120 mL de uma solução aquosa de 4,0 mol L<sup>-1</sup> de HCl, após dissolução do molde adicionou-se 8,9 mL de TEOS seguida de agitação mecânica (400 rpm) e magnética da solução por um período de 24 h à temperatura ambiente. Após este período a solução foi transferida para uma autoclave de Teflon®, colocada em uma estufa com circulação de ar e mantida durante um período de 48 h para realização de um tratamento hidrotérmico em uma temperatura de 100°C. O produto sólido resultante foi recolhido por filtração, lavado até eliminação do cloreto e secado em estufa a 60°C. A remoção do molde é feita em duas etapas: 1) O sólido seco é colocado em um aparato de *soxhlet* e submetido a um refluxo em etanol durante 12 h; 2) Após a extração por solvente a amostra é secada e submetida a uma calcinação controlada a uma razão de aquecimento de 2 °C min<sup>-1</sup>, da temperatura ambiente até 540°C em atmosfera de N<sub>2</sub> (200 mL min<sup>-1</sup>). Após atingir 540 oC a atmosfera de N<sub>2</sub> é trocada para ar (200 mL min<sup>-1</sup>) e mantido em isoterma durante 5 h.

#### 2.1.2 SÍNTESE DA FDU-12

A amostra de FDU-12 foi sintetizada conforme a literatura (KRUK, HUI, 2008): 1,0 g

de F127 e 2,5 g de KCl foram dissolvidos em 60 mL de HCl 2 mol L<sup>-1</sup>. Depois adicionou-se 2,2 g de TMB e a mistura foi agitada a 15 °C por 2 h em um recipiente fechado. Em seguida, adicionou-se 4,1 g de TEOS à mistura reacional resultante e mantendo-se sob agitação mecânica (400 rpm) e magnética durante 24 h. Transferiu-se então a solução para uma autoclave de Teflon® e levada para uma estufa com circulação de ar a 100°C durante 24h. O produto sólido foi recolhido por filtração e secado à temperatura de 60°C. O sólido seco foi calcinado sob condições controladas a uma razão de aquecimento de 2°C min<sup>-1</sup> da temperatura ambiente até 540 °C em atmosfera de N<sub>2</sub> (200 mL min<sup>-1</sup>) e trocada por ar ao atingir 540°C mantendo-se em isoterma durante um período de 5 h.

### 2.1.3 Síntese da SBA-15

A sílica mesoporosa foi sintetizada de acordo com o procedimento descrito por Zhao e colaboradores (ZHAO et al, 1998). Nesta síntese, 4 g de um copolímero tribloco (o surfactante Pluronic P123) foi solubilizado em 100 mL de HCl 1,6 mol L<sup>-1</sup> e aqueceu-se a solução a uma temperatura constante de 35°C, sob agitação. Depois da completa solubilização, adicionou-se 7,5 mL do precursor de sílica TEOS sob agitação. Foi distribuído este volume em autoclaves de 50 mL, levando-as para uma estufa microprocessada a 100°C por 48 h. O material foi posteriormente filtrado e seco a 50°C. O produto foi calcinado em um forno tubular a 300 °C por 4 h sob fluxo de nitrogênio, e depois a 540°C por 8 h sob fluxo de ar atmosférico, com uma taxa de aquecimento de 2°C min<sup>-1</sup>.

### 2.1.4 SÍNTESE DA MCM-41

O material mesoporoso foi sintetizado usando o procedimento de coprecipitação conforme relatado anteriormente (COSTA et al, 2008). Em um balão de fundo redondo de 3 L foi adicionado 510 mL de NH<sub>3</sub>(aq) concentrado em 675 mL de água. A esta mistura, adicionou-se 18,25 mL de cloreto de cetiltrimetilamônio (CTAC) com agitação constante e temperatura (30 - 35°C). Depois de alguns minutos, adicionou-se gota a gota 25 mL de tetraetilortosilicato (TEOS), sob agitação. Após 2 h, o produto resultante foi filtrado e lavado com água. O material foi seco e calcinado a 550°C (taxa de 5° min<sup>-1</sup>) durante 5 h em um forno mufla.

## 2.2 CARACTERIZAÇÃO DAS SÍLICAS MESOPOROSAS

As sílicas mesoporosas sintetizadas foram investigadas estrutural e morfológicamente utilizando um conjunto de técnicas:

- (i) Espectroscopia na região do infravermelho (FT-IR, Nicolet 6700) para verificação das absorções características dos materiais mesoporosos;
- (ii) Adsorção e dessorção nitrogênio gasoso (N<sub>2</sub>) a 77 K (ASAP, 2020C) para obtenção da área específica, diâmetro e volume de poros, sendo que as amostras foram submetidas a

um pré-tratamento térmico prévio (20  $\mu\text{m Hg}$ ) à temperatura de 200°C 4 h<sup>-1</sup> sob vácuo;

(iii) Ressonância magnética nuclear (RMN, Avance 600 MHz) de estado sólido com rotação no ângulo mágico (MAS) para análise dos ambientes químicos do átomo de <sup>29</sup>Si;

(iv) Microscopia eletrônica de transmissão (MET, Jeol Jem 2100) operando a 200 kV. Para análise, as amostras foram dispersas em álcool etílico, depositadas sobre uma rede de cobre de malha 400 coberta com carbono e secas à temperatura ambiente;

No que se refere ao estudo da acidez, as sílicas mesoporosas foram analisadas por:

(i) Termogravimetria e sua respectiva derivada (TG/DTG, SDT 2960) simulando uma dessorção térmica programada para determinação da densidade total de silanóis.

(ii) Calorimetria de adsorção de molécula prova em fase líquida (Calorimetry Sciences Corporation, Modelo 4300), estabilizada a 28,0000°C. Uma seringa foi usada para adições de solução de piridina a 0,1 mol L<sup>-1</sup> em ciclo-hexano anidro. Em uma câmara de atmosfera inerte de N<sub>2</sub>, 0,50 g da amostra e 25 mL de ciclo-hexano anidro foram adicionados a um frasco Dewar. Logo depois, pequenas adições entre 0,05 e 0,35 mL da solução de piridina foram feitas em intervalos de 3 min e o aumento de temperatura registrado.

(iii) Espectroscopia na região do infravermelho (FT-IR, Nicolet 6700) após experimento de adsorção em fase gasosa de piridina para verificação dos tipos de ambientes ácidos.

### 3 | RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os espectros FT-IR das sílicas mesoporosas calcinadas, apresentaram absorções características das vibrações da rede de sílica em torno de 465, 800 e 1100 cm<sup>-1</sup>, conforme Figura 1. A banda em torno de 1100 cm<sup>-1</sup> é referente ao estiramento assimétrico do tetraedro da rede de mesoporos atribuído ao grupo Si-O-Si. A banda em torno de 800 cm<sup>-1</sup> é relativa ao estiramento simétrico da ligação (Si-O-Si) e a banda em 465 cm<sup>-1</sup> está relacionada ao modo de vibração de deformação (Si-O-Si) (MOKHTAR e BASAHEL, 2014). As bandas em torno de 1640 cm<sup>-1</sup> e 3450 cm<sup>-1</sup> são atribuídas a presença de moléculas de água adsorvidas na superfície dos silanóis.



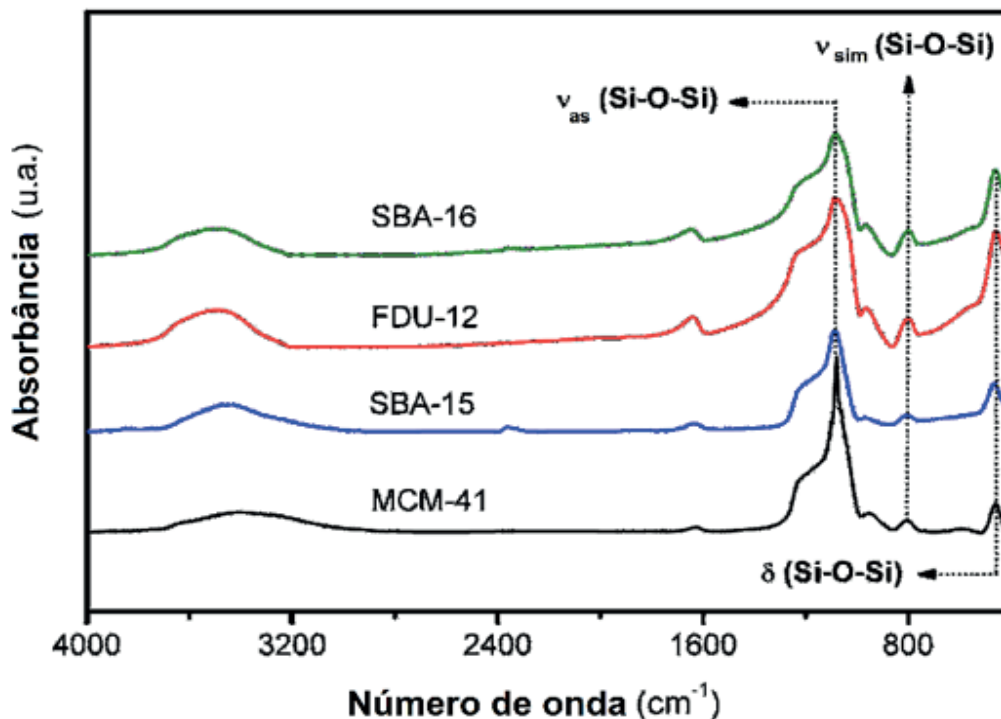


Figura 1. Espectros de FT-IR das sílicas mesoporosas estudadas.

As isotermas de sorção de nitrogênio (Figura 2) foram utilizadas para analisar as propriedades texturais das sílicas mesoporosas sintetizadas usando os modelos de Brunauer–Emmett–Teller (BET) e Barrett–Joyner–Halenda (BJH). Na região de valores de pressão relativa entre  $0,2 < p/p_0 < 0,95$  ocorreu a adsorção da segunda e terceira camadas de  $N_2$ , a qual é acompanhada pela condensação nos mesoporos. Em todas as amostras, observou-se uma alta adsorção de  $N_2$  a baixas pressões relativas ( $p/p_0 < 0,1$ ), juntamente com a condensação capilar característica nos mesoporos a  $p/p_0 \approx 0,43, 0,42, 0,65$  e  $0,41$ , para SBA-16, FDU-12, SBA-15 e MCM-41, respectivamente.

As amostras SBA-16 e FDU-12 exibem uma isoterma de sorção de nitrogênio tipo IV e histerese tipo H2 indicando materiais mesoporosos com poros tipo gaiola. Muitos adsorventes porosos originam este tipo de histerese, que corresponde uma distribuição de tamanhos e formas de poros definida. Por vezes associa-se este tipo de histerese aos diferentes mecanismos de condensação e evaporação em poros com uma janela estreita e cavidade larga. A histerese da FDU-12 apresentou etapas de condensação íngremes localizados em pressões relativas de  $0,85-0,88$  e etapas de evaporação capilares muito íngremes no limite inferior da histerese de adsorção-dessorção (pressão relativa  $0,48-0,49$ ). Esse comportamento sugeriu que este material apresenta poros do tipo gaiola com entradas mais estreitas (janelas).

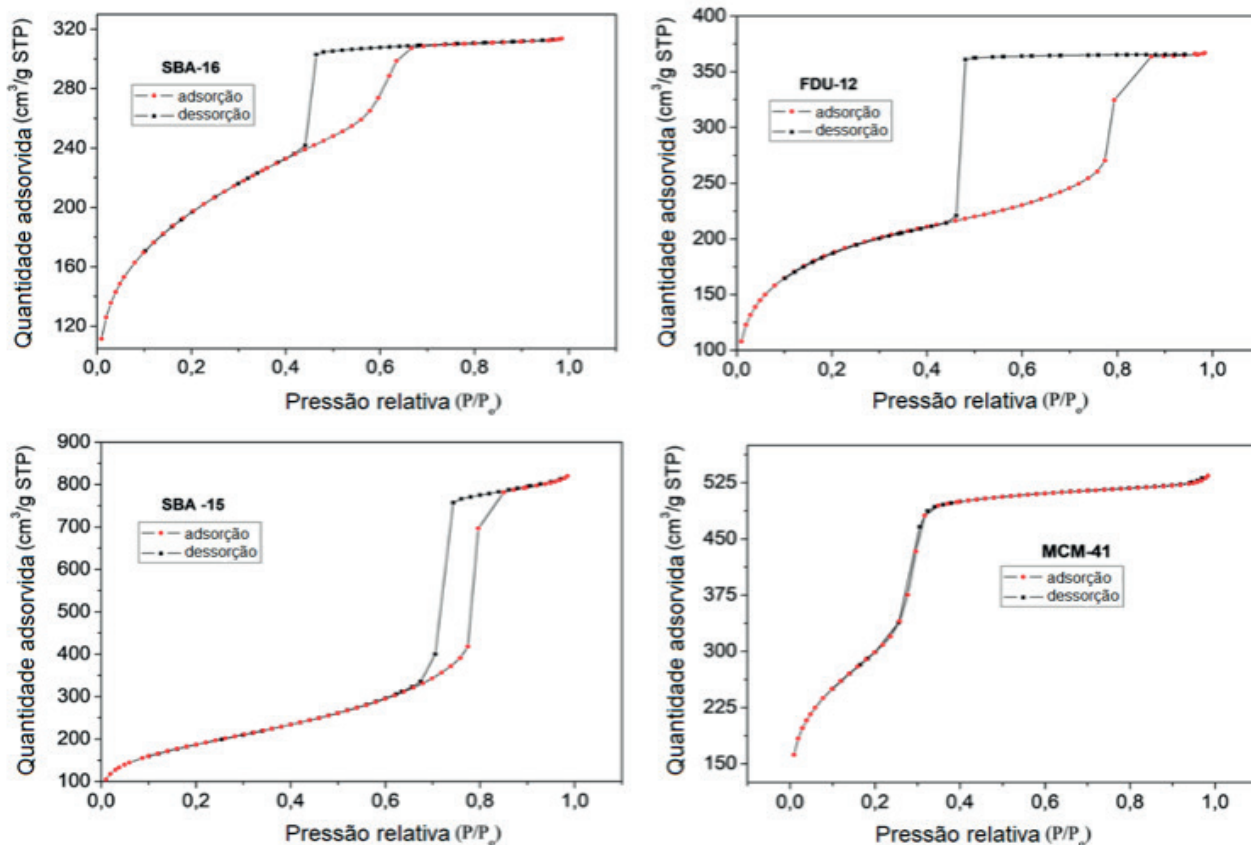


Figura 2. Isothermas de adsorção/dessorção de N<sub>2</sub> (77 K) das sílicas mesoporosas estudadas.

Materiais do tipo MCM-41 possuem isothermas do tipo IV, característica de materiais mesoporosos. No caso dos materiais do tipo SBA-15, as isothermas apresentam perfil semelhante, porém com a presença de histerese do tipo H1, associada a materiais porosos compostos por partículas esféricas uniformes ordenados, de acordo com a classificação da IUPAC. Todos esses comportamentos são compatíveis com amostras padrão na literatura (MEYNEN, COOL e VANSANT, 2009).

As principais propriedades texturais das amostras em investigação são resumidas na tabela abaixo, onde  $S_{\text{BET}}$  = área específica pelo método BET,  $P_s$  = tamanho médio de poro pelo método BJH,  $V_p$  = volume médio de poro pelo método BJH:

Amostra	SBA-16	FDU-12	SBA-15	MCM-41
S (m <sup>2</sup> /g)	704	604	683	1069
P <sub>s</sub> (nm)	7,1	5,2	7,6	2,6
V <sub>p</sub> (cm <sup>3</sup> /g)	0,4	0,6	1,1	0,9

Tabela 1. Propriedades texturais das sílicas mesoporosas sintetizadas.

A microscopia eletrônica de transmissão (MET) é uma técnica essencial para a verificação de estruturas de materiais. O MET pode produzir imagens que são as projeções da estrutura tridimensional e conter informações de fase cristalográfica. A Figura 3 mostra as imagens de MET das sílicas mesoporosas sintetizadas, cujas observações foram bastante concordantes com aquelas relatadas na literatura por Meynen, Cool e Vansant, (2009).

Para a SBA-16, imagens obtidas com o feixe incidente na direção paralela ao eixo dos poros (A), e na direção perpendicular ao eixo dos poros (B), confirmaram um arranjo cúbico de canais uniformes altamente ordenados.

Para a FDU-12, as imagens foram obtidas na direção [211] da cela unitária livre. Sob as observações do MET (A), a FDU-12 exibiu estrutura cúbica de face centrada (grupo espacial  $Fm\bar{3}m$ ), corroborando esta foi sintetizada com sucesso. Na FDU-12 cada cavidade esférica é conectada pelas cavidades vizinhas por meio de pequenas janelas. Se o sistema de poros dentro do FDU-12 é perfeitamente replicado, espera-se que a estrutura básica dos produtos seja um arranjo tridimensional de nanoesferas ligadas umas às outras por nanobastões curtos (como demonstrado em B).

As micrografias da amostra SBA-15, obtidas em diferentes orientações, revelaram o empacotamento hexagonal de cilindros mesoporosos, considerando que o feixe de elétrons foi introduzido ao longo dos canais (A). A imagem obtida com o feixe de elétrons introduzido perpendicularmente em relação à orientação dos poros, sugere o alinhamento dos canais, sendo os cilindros unidirecionais característicos da SBA-15 (B).

Por fim, para a amostra MCM-41, a imagem visualizada ao longo do eixo [010] (A) e a imagem visualizada ao longo do eixo [100] (B), revelaram mesoporos cilíndricos hexagonalmente ordenados.

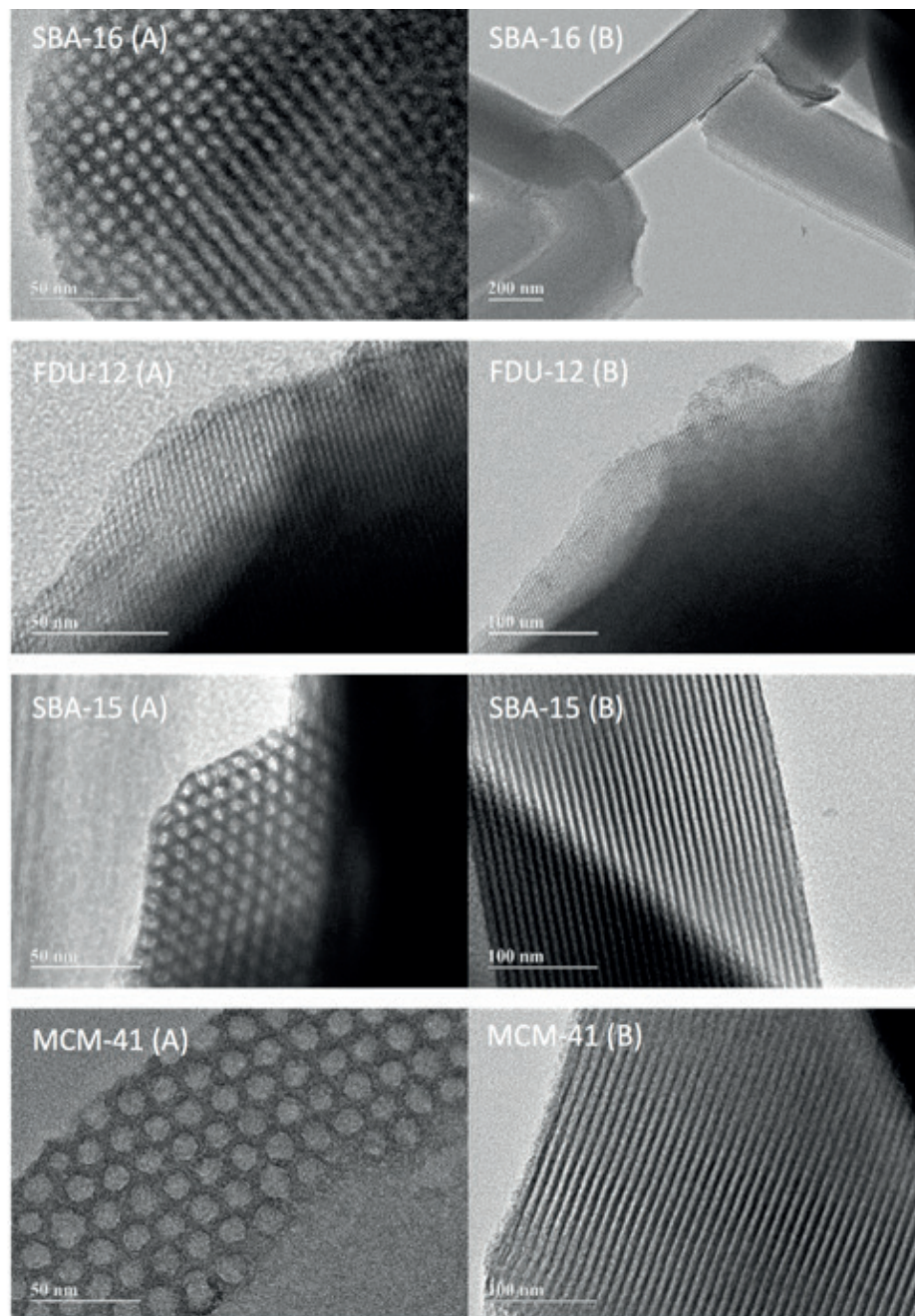


Figura 3. Micrografias (MET) das sílicas mesoporosas estudadas.

A ressonância do núcleo do isótopo 29 de silício ( $^{29}\text{Si}$ ) permite determinar o ambiente químico deste átomo, fornecendo informações importantes sobre a estrutura e composição dos silicatos mesoporosos (MACKENZIE e SMITH, 2002; MEYNEN, COOL e VANSANT, 2009). Os átomos de silício estão localizados no centro de tetraedros de oxigênio e a rede de sílica pode ser descrita usando-se a nomenclatura em termos de  $Q_n$  (MACKENZIE e SMITH, 2002). São espécies designadas como  $Q^4$  [ $\text{Si}(\text{OSi})_4$ ],  $Q^3$  [ $\text{Si}(\text{OSi})_3(\text{OH})$ ], onde temos a presença de um grupo silanol e  $Q^2$  [ $\text{Si}(\text{OSi})_2(\text{OH})_2$ ] com dois grupos silanóis. As unidades estruturais  $Q^4$  representam tetraedros de  $\text{SiO}_4$  interligados no interior das paredes do mesoporo, enquanto as unidades estruturais  $Q^3$  e  $Q^2$  estão presentes na superfície da parede associada aos grupos silanóis.

A Figura 4 mostra os espectros de MAS-RMN de  $^{29}\text{Si}$  das amostras SBA-16, FDU-12, SBA-15 e MCM-41 calcinadas, e as respectivas deconvoluções pela função composta

Gaussiana-Lorenztiana, com a finalidade de obter mais informações estruturais em relação as espécies  $Q^4$ ,  $Q^3$  e  $Q^2$ . As áreas abaixo dos sinais deconvoluídos são diretamente proporcionais às espécies das respectivas unidades estruturais da amostra, o que permite calcular a proporção relativa de ambientes de silício, o grau de condensação e a porcentagem molar de grupos silanóis, informações estas apresentadas na Tabela 2.

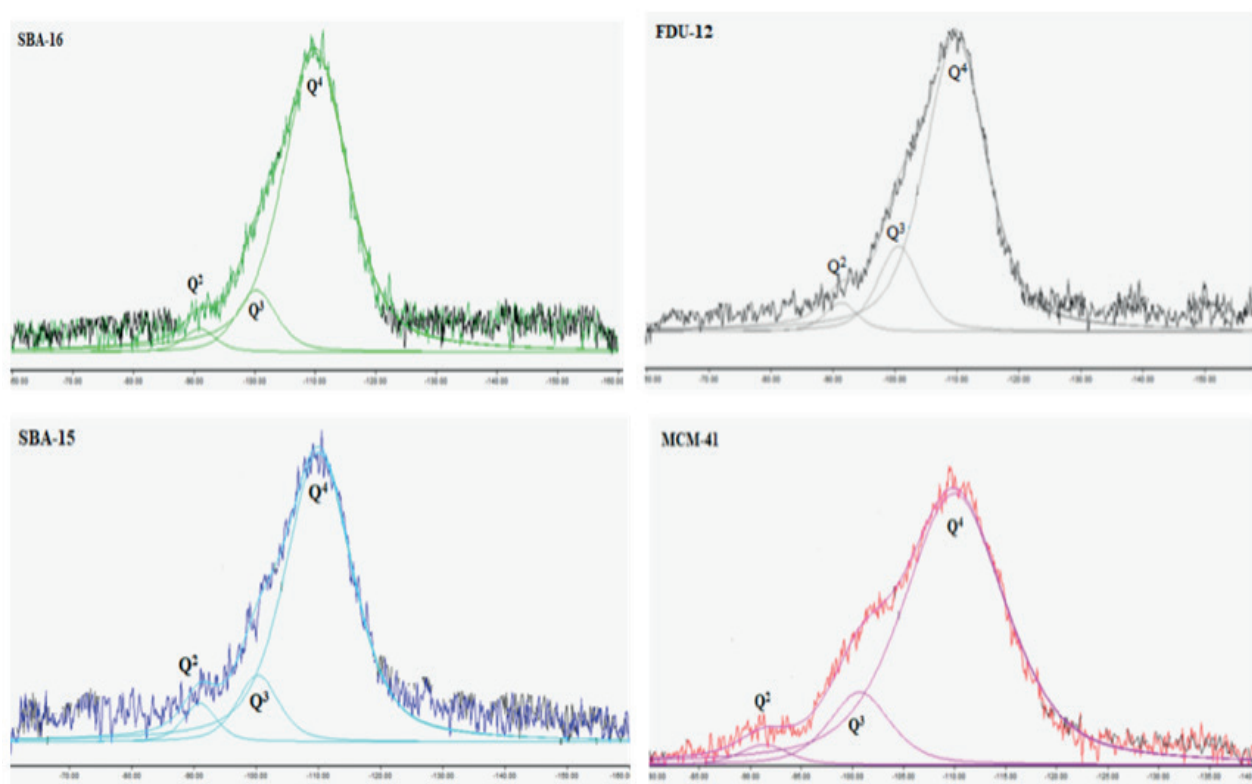


Figura 4. Espectros de MAS-RMN de  $^{29}\text{Si}$  das sílicas mesoporosas estudadas.

Para todas as sílicas mesoporosas, as intensidades relativas integradas dos sinais indicaram que a maioria dos átomos de silício pertence às subestruturas  $Q^4$ , enquanto os ambientes  $Q^2$  apresentaram a menor concentração. Entre as sílicas estudadas, a FDU-12 apresentou a maior concentração das espécies  $Q^3$  e  $Q^2$  (18%) e o grau de condensação (0,23), enquanto a SBA-16 apresentou a menor concentração de (14%) e o grau de condensação (0,17). A intensidade relativa dos valores de  $Q^n$  das sílicas mesoporosas depende fortemente do método de preparo e da temperatura de calcinação. A literatura enfatiza que dependendo dos parâmetros utilizados nestas etapas, as propriedades finais da superfície das sílicas (quantidade, distribuição dos grupos silanóis e a geometria do poro adotada) pode ser diferente. Por exemplo, foi afirmado que a SBA-15 e MCM-41 preparadas por diferentes rotas sintéticas e temperaturas de calcinação mostravam uma distribuição variável das espécies  $Q^2$ ,  $Q^3$  e  $Q^4$  (YANG et al., 2004; BRAGA et al., 2011).

Amostra	Q <sup>4</sup>	Q <sup>3</sup>	Q <sup>2</sup>	(Q <sup>2</sup> +Q <sup>3</sup> /Q <sup>4</sup> ) <sup>a</sup>	Si-OH (%) <sup>b</sup>
SBA-16	85,6	11,1	3,3	0,17	17,7
FDU-12	81,4	15,4	3,2	0,23	21,8
SBA-15	82,6	11,9	5,5	0,21	22,9
MCM-41	83,7	13,3	3,0	0,19	19,3

Tabela 2. Proporção relativa de ambientes de silício, grau de condensação e porcentagem molar de grupos silanóis, das sílicas mesoporosas estudadas. <sup>a</sup> Grau de condensação; <sup>b</sup> Quantidade relativa de grupos silanóis (mol% Si) =  $[(2Q^2 + Q^3)/(Q^2 + Q^3 + Q^4)] \times 100$

A distribuição relativa dos diferentes ambientes químicos e a quantidade percentual de Si-OH representam parâmetros importantes na determinação das prováveis reatividades das amostras, no entanto, é importante ter em mente que estes por si somente não são uma indicação da força dos sítios das sílicas mesoporosas, sendo necessários estudos complementares para determinação da acessibilidade e natureza dos silanóis de superfície.

Uma medição quantitativa do total de grupos OH e sua respectiva densidade considerando a área superficial específica (Tabela 3) foi realizada com os resultados obtidos por termogravimetria, seguindo equações e o modelo de Zhuravlev proposto na literatura (POTAPOV e ZHURAVLEV, 2010). O total de grupos OH representa o máximo de locais que cada sílica mesoporosa pode apresentar e ser acessado por uma molécula sonda adequada, i.e., tamanho e condição de adsorção apropriados.

Obtidos esses resultados, determinaram-se então a força (entalpia) e o número médio dos sítios ácidos mais fortes (Tabela 3) por microcalorimetria em fase líquida de adsorção de piridina (py) como sonda. Pode-se notar que a quantidade total de sítios ácidos acessados pela piridina (n<sub>1</sub> + n<sub>2</sub>) é inferior a aquela do total de grupos OH obtida pelo TG/DTG, demonstrando que existe um fator de disponibilidade real dos sítios ácidos presentes nas estruturas destes materiais, sendo evidenciada que nem todos estes são acessíveis para sonda utilizada. Existem razões que podem levar a que as concentrações no local sejam inferiores ao número real de OH na superfície de um material, como: hidroxilas inativas; interação estérica entre moléculas adjacentes que impede que um sítio OH seja acessível (GORTE, 1994).

Amostra	nT OH <sup>a</sup> (mmol/g)	αOH <sup>b</sup> (OH/nm <sup>2</sup> )	-ΔH <sub>1</sub> (kJ/mol)	n <sub>1</sub> (mmol/g)	-ΔH <sub>2</sub> (kJ/mol)	n <sub>2</sub> (mmol/g)
SBA-16	1,68	1,44	66,1	0,28	58,6	0,32
FDU-12	1,61	1,60	74,5	0,26	56,2	0,41
SBA-15	2,57	2,26	39,0	0,06	24,3	0,40
MCM-41	1,46	0,82	68,3	0,27	45,8	0,74

Tabela 3. Número total de grupos silanóis obtido da dessorção térmica, entalpia média e número de sítios obtidos pela microcalorimetria de adsorção de piridina, considerando modelo de dois sítios. a Número total de grupos silanóis obtido por TG/DTG; b Densidade de silanóis - Cálculo de Zhuravilev =

$$\frac{nOH * (6,02 * 10^{23}) * 10^{-18}}{S_{BET}}$$

Com base na entalpia de adsorção de py com os sítios acessados mais fortes, a ordem de acidez encontrada foi: FDU-12 > MCM-41 > SBA-16 > SBA-15 com  $-\Delta H_1 = 74,5, 68,3, 66,1$  e  $39,0 \text{ kJ mol}^{-1}$ , respectivamente. A ordem da acidez reflete a acessibilidade da piridina aos grupos silanóis no interior dos poros das amostras. Embora todos os poros sejam grandes o suficiente para permitir a entrada de piridina, o local exato para a fixação da molécula não é o mesmo. Algumas das moléculas de piridina podem ser ligadas à superfície externa das diferentes amostras, as quais apresentam uma variedade de morfologias. No entanto, para as sílicas aqui estudadas, todas as entalpias dos locais mais fortes foram maiores que o da sílica gel, o que confirmou um estudo anterior para a MCM-41 (BRAGA et al., 2011). Esses valores indicam um ambiente de grupo silanol altamente polar dentro dos canais das sílicas mesoporosas, que provavelmente expõe os grupos hidroxila nas paredes mesoporosas devido à rigidez de sua estrutura. O efeito de confinamento dos grupos silanóis da estrutura no interior dos poros provavelmente aumentará a distância de ligação O-H, o que fortaleceria a interação de ligação de hidrogênio com a piridina.

Os espectros de piridina adsorvida no FT-IR (Figura 5) confirmam que apenas ligação de hidrogênio está presente nas sílicas mesoporosas com duas bandas em todas as amostras. Isso concordou com a literatura (CHRONISTER e DRAGO, 1993; BRAGA et al., 2011), que atribuiu essas bandas como diferentes grupos Si-OH na superfície. Quando isolados, estes são ácidos mais fracos em comparação com os grupos em ponte, que têm pelo menos três grupos silanóis sendo compartilhados. Assim, o local mais forte é formado por essas hidroxilas de ponte e o segundo local provavelmente está relacionado ao silanol isolado. O silanol isolado na superfície tem maior suscetibilidade à di-hidroxilação do que os grupos hidroxila nos das amostras.

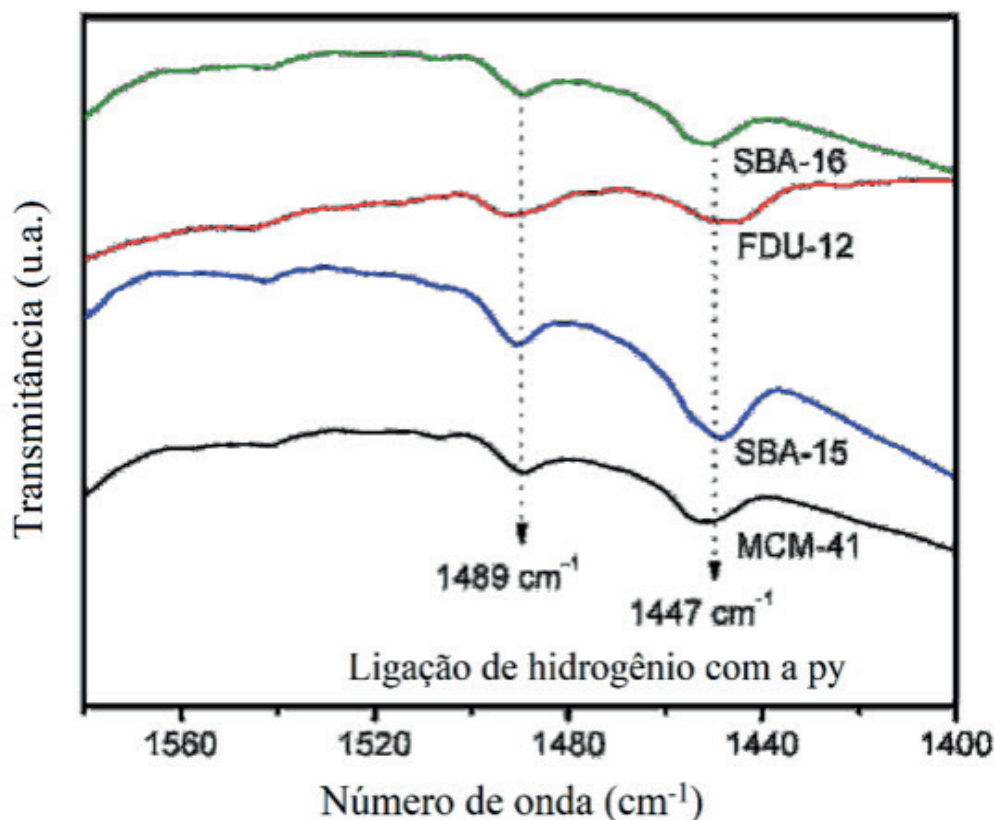


Figura 5. Espectros FTIR de piridina adsorvida nas sílicas mesoporosas estudadas.

#### 4 | CONCLUSÃO

A preparação de sílicas mesoporosas ordenadas são de crescente interesse na pesquisa devido as suas várias aplicações em reações ou separações envolvendo moléculas grandes. Esse trabalho descreveu a síntese, caracterização e propriedades ácidas das sílicas mesoporosas com estrutura cúbica (SBA-16 e FDU-12) e mesoestrutura hexagonal (SBA-15 e MCM-41). As análises de FT-IR, adsorção/dessorção de  $N_2$  a baixa temperatura (77 K), MET e MAS-RMN de  $^{29}Si$  confirmaram que as sínteses adotadas produzem sólidos com poros definidos e com ordenamento estrutural de longo alcance. Pode ser determinado por calorimetria de adsorção de piridina em fase líquida que as sílicas mesoporosas sintetizadas possuem dois sítios ativos diferentes, sendo mais fortes que os da sílica gel e apresentando para os sítios mais fortes a seguinte ordem: FDU-12 ( $\Delta H = -74,5 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) > MCM-41 ( $\Delta H = -68,3 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) > SBA-16 ( $\Delta H = -66,1 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) > SBA-15 ( $\Delta H = -39,0 \text{ kJ mol}^{-1}$ ).

Uma importante discussão sobre a real disponibilidade de grupos ácidos silanóis presentes nas estruturas destes materiais foi elencada, sendo evidenciada que nem todos são acessíveis pela molécula prova. Por fim, demonstrou-se que a natureza da acidez das sílicas mesoporosas estava relacionada a sítios de ligação de hidrogênio presentes na superfície e sobretudo, os mais fortes, nos poros dos materiais.



## REFERÊNCIAS

- BIAGLOW, A. I. et al. **A Study of Dealuminated Faujasites**. *Journal of Catalysis*, v. 148, n. 1, p. 213–223, jul. 1994.
- BRAGA, P. R. S. et al. **Liquid phase calorimetric-adsorption analysis of Si-MCM-41: Evidence of strong hydrogen-bonding sites**. *Microporous and Mesoporous Materials*, v. 139, n. 1–3, p. 74–80, mar. 2011.
- CHRONISTER, C. W.; DRAGO, R. S. **Determination of hydrogen-bonding acid sites on silica using the Cal-Ad method**. *Journal of the American Chemical Society*, v. 115, n. 11, p. 4793–4798, jun. 1993.
- COSTA, A. A. et al. **Immobilization of Fe, Mn and Co tetraphenylporphyrin complexes in MCM-41 and their catalytic activity in cyclohexene oxidation reaction by hydrogen peroxide**. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, v. 282, n. 1–2, p. 149–157, mar. 2008.
- GRUDZIEN, R. M.; GRABICKA, B. E.; JARONIEC, M. **Effective method for removal of polymeric template from SBA-16 silica combining extraction and temperature-controlled calcination**. *J. Mater. Chem.*, v. 16, n. 9, p. 819–823, 2006.
- KRUK, M.; HUI, C. M. **Synthesis and characterization of large-pore FDU-12 silica**. *Microporous and Mesoporous Materials*, v. 114, n. 1–3, p. 64–73, set. 2008.
- MACKENZIE, K.; SMITH, M. E. **Multinuclear Solid-State Nuclear Magnetic Resonance of Inorganic Materials**. [s.l.] Pergamon, 2002.
- MEOTO, S. et al. **Effect of stirring rate on the morphology of FDU-12 mesoporous silica particles**. *Microporous and Mesoporous Materials*, v. 249, p. 61–66, set. 2017.
- MEYNEN, V.; COOL, P.; VANSANT, E. F. **Verified syntheses of mesoporous materials**. *Microporous and Mesoporous Materials*, v. 125, n. 3, p. 170–223, out. 2009.
- MOKHTAR, M.; BASAHEL, S. N.; ALI, T. T. **Ethanol to hydrocarbons using silver substituted polyoxometalates: Physicochemical and catalytic study**. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, v. 20, n. 1, p. 46–53, jan. 2014.
- PEREGO, C.; MILLINI, R. **Porous materials in catalysis: challenges for mesoporous materials**. *Chem. Soc. Rev.*, v. 42, n. 9, p. 3956–3976, 2013.
- POTAPOV, V. V.; ZHURAVLEV, L. T. **Temperature Dependence of the Concentration of Silanol Groups in Silica Precipitated from a Hydrothermal Solution**. *Glass Physics and Chemistry*, v. 31, n. 5, p. 661–670, set. 2005.
- TAGUCHI, A.; SCHÜTH, F. **Ordered mesoporous materials in catalysis**. *Microporous and Mesoporous Materials*, v. 77, n. 1, p. 1–45, jan. 2005.
- YANG, C.-M. et al. **Stepwise Removal of the Copolymer Template from Mesopores and Micropores in SBA-15**. *Chemistry of Materials*, v. 16, n. 15, p. 2918–2925, jul. 2004.
- ZHAO, D. et al. **Nonionic Triblock and Star Diblock Copolymer and Oligomeric Surfactant Syntheses of Highly Ordered, Hydrothermally Stable, Mesoporous Silica Structures**. *Journal of the American Chemical Society*, v. 120, n. 24, p. 6024–6036, jun. 1998.

## ÍNDICE REMISSIVO

### A

Água Subterrânea 36, 39, 40, 41, 42, 202, 207  
Aldeídos Aromáticos 160, 161, 167  
Análise Numérica 44, 45, 51  
Aquecimento 43, 101, 111, 115, 137, 138, 148, 149, 228  
Aquífero 30, 31, 34, 35  
Associativismo 249, 250, 251, 252, 253, 254, 257, 258

### B

Biocontrole 119, 120

### C

Cadastro Territorial 1, 3, 11  
Células Solares 133, 137, 138, 143  
Cinética de Secagem 109, 111, 112, 115, 116, 117  
Classificação 32, 40, 152, 183, 184, 185, 186, 188, 192, 193, 197, 199  
Comunidade 89, 137, 147, 162, 175, 249, 250, 251, 252, 253, 254, 255, 256, 257, 258  
Contaminação 29, 30, 32, 35, 37, 38, 39, 41, 201, 202, 227, 228, 231, 246  
Correntes Atmosféricas 226, 227

### D

Demarcação 1, 2, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 256  
Dispositivos Eletrônicos 93  
Doença Fúngica 225, 227

### E

Espectrofotometria 200, 202

### F

Fenômeno Atmosférico 87, 227  
Ferrugem Asiática 225, 226, 227, 228, 229, 230, 231, 238, 239

### H

Hidrodestilação 120, 122  
Hidrogeologia 30, 32, 34, 42

## I

Informação 31, 59, 60, 86, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 101, 103, 104, 105, 106, 107, 108, 173, 179  
Ionosfera 55, 56, 66, 67, 68, 69, 70, 72, 74, 75

## L

Larvicida 120, 121, 123, 125, 126, 128  
Linha de Preamar Média 1  
Lixo Eletrônico 93, 95, 96, 97, 98, 99, 101, 102, 103, 104, 105, 107

## M

Malha Computacional 43, 45, 49, 52, 231, 232, 233, 234, 235, 236, 239  
Marinha 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12  
Material Polimérico 170, 171, 177  
Mercado Informal 88  
Modelagem 13, 14, 28, 43, 45, 47, 52, 111, 117, 226  
Modelagem Matemática 43, 47, 117, 226  
Modelagem Numérica 13, 14, 28, 43  
Multivariada 30, 31, 35, 39, 41, 200, 202

## O

Óleo Essencial 119, 120, 122, 124, 125, 126, 127, 128  
Óleo Fúsel 240, 241, 242, 243, 244, 245, 246, 247, 248  
Onda Eletromagnética 55, 59, 61, 64, 70, 75, 82, 87

## P

Pedogênese 183, 184, 186, 199  
Peneiras Moleculares 146, 148  
Plantas Daninhas 200, 201, 227, 246, 247  
Plataforma Continental 13  
Plumas de Emissários 13  
Polímeros 133, 136, 138, 139, 141, 143, 144, 170, 171, 173, 174, 175, 176, 177, 181, 261  
Processamento 44, 45, 47, 48, 49, 52, 97, 109, 114, 137, 144, 181, 236, 241  
Processo de Secagem 109, 110, 112, 114, 115  
Processos Pedogenéticos 183, 185, 186, 191, 192, 194, 196, 199  
Propriedades Medicinais 120

## R

Reaproveitamento 105, 240, 246, 247  
Região Costeira 13, 14

Resfriamento 43

Resíduos 47, 101, 103, 105, 106, 195, 240, 245, 273

## S

Sílicas Mesoporosas 146, 147, 148, 149, 150, 151, 152, 154, 155, 156, 157, 158

Sistemas Dinâmicos 76

Sistemas Ópticos 76

Solventes Orgânicos 200, 202

## T

Tecnologia 57, 60, 93, 95, 97, 99, 100, 104, 105, 106, 108, 239, 273

Terras Raras 133, 137, 138, 143, 259, 261, 262, 263, 268

Terrenos 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12

## U

Umidade 66, 77, 109, 110, 111, 112, 113, 114, 115, 116, 117, 123, 197, 198

## V

Variabilidade Ambiental 183, 184

Vulnerabilidade 11, 30, 31, 32, 34, 35, 37, 38, 39, 41

 **Atena**  
Editora

**2 0 2 0**