

A sociedade cobra de pesquisadores e cientistas a divulgação de pesquisas, que afetam, direta ou indiretamente, seu dia-a-dia. O pesquisador, por sua vez, precisa dar prosseguimento ao desenvolvimento científico, comunicando o que pesquisou, criou ou desenvolveu. Portanto, somente a plena consciência, da escrita, como sendo um ato social, bem como, de seu papel enquanto comunicador da ciência, pode tornar essa atividade acessível a mudanças. Dentro dessa ótica, o CETEM pode esperar que seus técnicos sejam cada vez mais eficientes na comunicação e divulgação de suas pesquisas e descobertas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. CARNEIRO, Agostinho D. *Redação em Construção: a escritura do texto*. São Paulo: Moderna, 1993. 200p.
2. ECO, Umberto. *Como se faz uma tese*. 11ed. São Paulo: Perspectiva, 1977.
3. FEITOSA, Vera. *Comunicação na tecnologia*. São Paulo: Brasiliense, 1987. 155p.
4. FEITOSA, Vera. *Textos de trabalho como objeto de intervenção ergonômica*. COPPE/UFRJ, out, 1993. (qualificação ao doutorado- Programa de Engenharia de Produção). 82p.
5. GARCIA, Othon M. *Comunicação em prosa moderna*. Rio de Janeiro: Fundação Getúlio Vargas, 1967.
6. KLEIMAN, Ângela. *Texto e Leitor: aspectos cognitivos da leitura*. Campinas: Pontes, 1989.
7. KOCH, Ingedore G.V. *A coerência textual*. São Paulo: Contexto, 1990. 93p.
8. McGRIMMON, James. *Writing with a purpose*. 2ed. Cambridge: The Riverside Press, 1957. 630p.
9. MORENO, Claudio; GUEDES, Paulo C. *Curso básico de redação*. São Paulo: Ática, 1979. 128p.
10. TERRA, Ernani. *Curso prático de gramática*. 7ed. São Paulo, 1988. 302p.

PAINEL 11

Estudo do Processo de Extração de Íons Metálicos por Modelagem Molecular

Luiz Claudio Kock Cerqueira

Bolsista de Inic. Científica, Eng. Química, UFRJ

Peter Rudolf Seidl

Orientador, Químico Industrial, Ph.D.

1. INTRODUÇÃO

A modelagem molecular é uma área da química que procura visualizar as estruturas de determinadas espécies, analisando a posição no espaço dos átomos que as compõe, podendo com isso então compreender e prever certas propriedades físicas e químicas das moléculas.

Com o desenvolvimento da mecânica quântica, o universo sub-microscópico passou a ser estudado com um enfoque diferente. Elétrons agora são descritos como pequenas partículas que apresentam características de ondas e, portanto, podem ser descritos como tais. A partir de tal compreensão, foram criadas teorias que podem prever a estrutura de moléculas pelo conhecimento das partículas que as compõe e a forma pela qual elas interagem entre si.

Alguns fatores, como distâncias de ligação, ângulos de ligação e ângulos de torção, podem ser traduzidos como funções que ditam o comportamento da energia interna de moléculas, cujos parâmetros dependem dos átomos que estão ligados. O conjunto de tais informações compõe um determinado campo de força, que deve adaptar-se ao problema estudado. De posse

de um campo de força, pode-se moldar uma estrutura, visando-se a minimizar a energia dos diversos tipos de interações entre os átomos que a compõe. Pode-se simular os mais variados ensaios que dependam da estrutura de um ou mais compostos, desde um espectro de raios X de um cristal até adsorção de gases em um zeólito.

O gálio é um metal cujo interesse na indústria elétrico-eletrônica se torna cada vez maior, devido às propriedades de um *chip* de arseneto de gálio, que é muito mais eficiente em relação aos tradicionais de silício. Um método comumente usado na obtenção de gálio é a extração por solvente. Esse processo envolve transferência de substâncias de uma fase polar para uma apolar. O gálio se encontra solubilizado em uma solução fortemente alcalina (pela adição de NaOH) e é extraído dessa fase por um agente complexante, que também apresenta certa solubilidade nessa fase, porém é mais solúvel na apolar. Sabe-se também que o complexo íon-extratante apresenta tal comportamento.

2. OBJETIVO

Uma vez que a estrutura do complexo de extração pode influenciar esse processo, a modelagem molecular visa relacionar a estrutura desse centro com a possibilidade de melhoria da extração por meio do conhecimento e posterior manipulação dessa estrutura. O objetivo deste trabalho concentra-se numa avaliação preliminar desse assunto.

3. METODOLOGIA

Agentes quelantes muito utilizados nas operações de extração por solvente são os da família dos KELEX (7-alkila-8-hidroxiquinolina, no qual esse grupo alkila é uma cadeia apolar grande). Tomou-se como base o 7-(4-etil-1-metil-8-octil) 8-hidroxiquinolina, cujo nome comercial é KELEX-100, devido à sua grande importância nos processos de extração líquido-líquido.

A primeira fase do trabalho visou relacionar as estruturas de diversos complexos, geradas por um *software* comercial contendo os íons Ga^{3+} , Al^{3+} , In^{3+} e Na^+ com a probabilidade dos mesmos serem melhor extraídos, se feita uma extração competitiva entre eles em um determinado conjunto extratante/solvente. O *software* CERIUS (ref. 1) da *Molecular Simulations* foi utilizado como ferramenta para realizar os cálculos na simulação tanto dos extratantes como dos complexos.

Devido à incerteza da geometria do complexo, foi necessário simular, para mesmos extratantes e metal, várias geometrias diferentes para o complexo de extração. O objetivo de tal experimento foi observar se a seletividade do extratante se reproduz para uma mesma geometria com os diferentes metais. Uma das estruturas sugeridas (2) do complexo com Ga tem estrutura bi-pirâmide trigonal e foi tomada como base para comparar as aproximações feitas pelo *software*, sendo o 5-metil-hidroxiquinolina o agente quelante. As outras geometrias estudadas também são prováveis para o complexo. Para saber a real geometria do composto, precisa-se realizar análises espectroscópicas do complexo.

Depois de geradas as estruturas, não foi possível o processo de análise baseou-se nas diferenças de energia de ligação entre os complexos, pois essas estavam na ordem de 1 kcal/mol. O critério de seleção consistiu em visualizar qual complexo teria os agentes quelantes melhor distribuídos em volta do íon central, para as determinadas geometrias, sendo a aproximação da forma teoricamente mais estável o critério de idealidade.

Para cada tipo de geometria, existem valores de ângulos de ligação característicos que representam a configuração em que há menor interação possível entre os átomos ligados. Na geometria tetraédrica, os ângulos são iguais e valem 104.5° em uma estrutura relativamente simples, como o metano, e começam a apresentar desvios desse valor conforme o grau de complexidade da estrutura aumenta. Em uma geometria octaédrica, os ângulos também são iguais e valem 90° ,

observando-se o mesmo no que se trata à mudança dos ângulos com o aumento da complexidade da molécula. Como "critério de idealidade", se leva em consideração que o complexo cujos ângulos se desviam menos do valor previsto para cada geometria, deve ser mais estável que aquele que apresenta maiores distorções, além do fato de que as distâncias de ligação devem ser coerentes com dados existentes na literatura.

4. RESULTADOS OBTIDOS

Abaixo encontram-se alguns exemplos de valores de ângulos, distâncias e energia de ligação de alguns compostos simulados pelo *software* e outros existentes em literatura.

Geometria do complexo bi-pirâmide trigonal bis-2metil-hidroxiquinolina/Cl com Ga. Os dados estão apresentados na Tabela 1, aqueles à esquerda são dados espectrográficos, e os à direita são do composto simulado.

Tabela 1- Dados relativos à geomtria do complexo bi-pirâmide trigonal bis-2metil-hidroxiquinolina/Cl com Ga

a) Distâncias de ligação (Å):	
N ₁ Ga-1,876	N ₁ Ga-2,110
O ₁₂ Ga-1,855	O ₁₂ Ga-1,879
O ₃₂ Ga-1,825	O ₃₂ Ga-1,855
N ₂₁ Ga-1,858	N ₂₁ Ga-2,110
ClGa-2,197	ClGa-2,195
b) Ângulos de ligação (graus):	
ClGaN ₁ -93,2626	ClGaN ₁ -95,1
ClGaN ₂₁ -84,8270	ClGaN ₂₁ -95,7
ClGaO ₁₂ -129,9401	ClGaO ₁₂ -113,7
ClGaO ₃₂ -115,5060	ClGaO ₃₂ -120,3
N ₁ GaN ₂₁ -145,8003	N ₁ GaN ₂₁ -169,1
O ₁₂ GaO ₃₂ -109,7152	O ₁₂ GaO ₃₂ -126,0
N ₁ GaO ₃₂ -118,6679	N ₁ GaO ₃₂ -89,8
N ₂₁ GaO ₃₂ -92,1490	N ₂₁ GaO ₃₂ -84,3
N ₁ GaO ₁₂ -82,9047	N ₁ GaO ₁₂ -84,2

c) Energia de ligação (E=93,349146 Kcal/mol).

A numeração utilizada é a mesma fornecida pelo *software* CERIUS para todos os compostos citados, exceto o "composto 5" que mantém a mesma numeração do artigo original (2). No referente ao CERIUS:

$$N_1=N_8, N_{21}=N_{19}, O_{12}=O_{17} \text{ e } O_{32}=O_{29}.$$

Outros resultados obtidos, referentes a complexos de geometria tetraédrica, são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2 - Resultados obtidos com complexos de geometria tetraédrica

Complexo	Distância em Å
Al-N	1,73
Al-O	1,0
Ga-N	1,87
Ga-O	1,85
In-N	2,03
In-O	2,01
Na-N	2,48
Na-O	2,47

Comparando os valores do "composto 5" com os existentes em literatura, conclui-se que o campo de força utilizado fornece, resultados bem próximos de distância de ligação (0,65 Å de diferença), mas quando se analisa os ângulos de ligação, se percebe uma grande discrepância de 30° em determinados valores.

Quando se compara as geometrias de todos os compostos gerados, os de sódio se afastam mais do critério adotado. O íon que melhor se adapta a tal critério é o índio, seguido pelo gálio e pelo alumínio. Isso deve significar que, se realizada a extração de todos os íons, o complexo de In seria extraído mais efetivamente que o de Ga, o de Al e, por último, o de Na, cujas distorções são maiores.

5. CONSIDERAÇÕES GERAIS

Pelos resultados obtidos com o *software*, há indicações de que as premissas feitas referentes à ordem de extração parecem corresponder aos dados reais. Sabe-se que no processo de extração em que se usa KELEX-100 como agente quelante, o gálio é melhor extraído que alumínio e sódio (3), o que indica coerência nos resultados fornecidos pelo *software*.

A utilização do sódio nas comparações não correspondeu às expectativas iniciais, pois o composto gerado ficou muito diferente dos outros, não se devendo utilizar esse íon no decorrer do estudo. Foram também simulados complexos com outros agentes quelantes além do KELEX-100, cujos resultados tiveram as mesmas características dos acima expostos. Outro fator a ser observado é a grande discrepância em relação aos ângulos. Deve-se dar mais importância às distâncias de ligação nas análises. Para se ter uma idéia exata do quanto esses resultados são reais, é necessário realizar testes em laboratório, para comprovar ou não o que foi previsto.

5. BIBLIOGRAFIA

1. MOLECULAR SIMULATIONS, INC, User Manual CERIU Version 3.2 (1994).
2. MIHAYLOV, DISTIN, P.A. Gallium Solvent Extraction in Hydrometallurgy An Overview: Amsterdam. Hydrometallurgy, v. 28, p. 13-27, 1992.
3. BORGES, P.P., MASSON, I.O.C. Solvent Extraction of Gallium with KELEX-100 from Brazilian Weak Sodium Aluminate Solution. Rio de Janeiro: CETEM, 1993.

PAINEL 12

Ambiente Gráfico de Auxílio à Utilização de Modelagem Molecular

Patrícia Alves Dias de Rosa e Rio
Bolsista de Inic. Científica, Eng. Química, PUC/RJ

Peter Rudolf Seild
Orientadora, Químico Industrial, Ph.D.

1. INTRODUÇÃO

A Modelagem Molecular por computador tem a finalidade de simular estruturas e suas respectivas interações. Além disso visa a auxiliar os químicos em seus estudos e análises das estruturas moleculares.

Isso se dá através da utilização de sistemas computacionais - *hardware* e *software* - de alto nível e, conseqüentemente, de difícil compreensão para pessoas que não sejam usuários familiarizados com esse tipo de sistema.

Tendo em vista disseminar a cultura da Modelagem Molecular no CETEM, formou-se um Núcleo de Modelagem Molecular voltado para atender às seguintes tarefas básicas: suporte computacional ao usuário, desenvolvimento de uma interface gráfica para usuários, suportes químico ao usuário e aos aplicativos de Modelagem Molecular.

Dentro desse contexto, está em desenvolvimento uma interface gráfica de auxílio, que possibilita ao usuário da Modelagem Molecular utilizar os sistemas computacionais disponíveis, de