

## PAQ-15

### ESTUDIO COMPARATIVO DE LA ADSORCIÓN DE Pb, Hg Y Cd EN QUITOSANO Y PELLETS DE QUITOSANO-PECTINA

A. Debbaudt<sup>1</sup>, M. L. Ferreira<sup>2</sup>, M. E. Gschaider<sup>1</sup>, E. Agulló<sup>1</sup>

<sup>(1)</sup>Laboratorio de Investigaciones Básicas y Aplicadas en Quitina (LIBAQ), UNS,  
Departamento de Química, Avda Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, R. Argentina

<sup>(2)</sup>PLAPIQUI-UNS-CONICET, Camino La Carrindanga Km 7, CC 717,  
8000 Bahía Blanca, R. Argentina, E-mail: megschair@criba.edu.ar

Recientemente este grupo de trabajo ha logrado sintetizar pellets de pectina-quitosano que mostraron excelente eficiencia en la adsorción de iones de metales pesados en bajas concentraciones en solución acuosa ( $\text{Cd}^{+2}$ ,  $\text{Hg}^{+2}$  y  $\text{Pb}^{+2}$ ) (1). Teniendo en cuenta el comportamiento químico disímil de estos iones a distintos pHs y la estructura de los pellets, se estudió el problema de la adsorción tanto teórica como experimentalmente, en especial para Pb y Hg. En primer lugar se analizaron por separado pectina y quitosano como polvos en su capacidad como adsorbentes, en proporciones similares a las que se utilizan en los pellets, sin control del pH. Los resultados obtenidos se racionalizaron a través de un extenso estudio de los cambios conformacionales que ocurren en quitosano-quitina y pectina a través de la aplicación de métodos de mecánica molecular (MM2 de Chem 3D 5.0 Ultra Cambridge Soft 1999). También se consideró la interacción electrónica de los iones Hg y Pb, teniendo en cuenta la hidrólisis en el caso del  $\text{Hg}^{+2}$ , utilizando el Método de Hückel Extendido y PM3. Estos métodos semiempíricos permiten establecer tendencias cualitativas válidas que dan sustento a los modelos de adsorción-reacción propuestos para estos iones (2, 3).

El presente trabajo presenta resultados cinéticos y termodinámicos obtenidos en la adsorción de  $\text{Cd}^{+2}$  sobre quitosano, pectina y pellets de quitosano-pectina en forma comparativa con los obtenidos para  $\text{Hg}^{+2}$  y  $\text{Pb}^{+2}$ . Teniendo en cuenta los cálculos de MM2 aplicados a la adsorción de  $\text{Cd}^{+2}$  en distintas formas, tanto intra- como intermoleculares, se propone un modelo de adsorción para Cd que pondera los hechos experimentales.

El efecto sinérgico en la adsorción sobre los pellets de quitosano-pectina, que se observó en el caso de Hg y Pb, se encuentra también para Cd.

Las tablas 1 y 2 resumen algunos de los resultados teóricos y experimentales obtenidos.

Tabla 1- Porcentajes de adsorción y pH finales para Pb, Cd y Hg -pH inicial=5

Concentraciones en ug /ml solución constantes en todos los casos

Pellets  $C_i$  Pb=103.5 ug/g  $C_i$  Hg=15 ug/g  $C_i$  Cd=12 ug/g

Quitosano  $C_i$  Pb=47045.4 ug/g  $C_i$  Hg=6863.6 ug/g  $C_i$  Cd=5443.6 ug/g

Pectina  $C_i$  Pb=9409.1 ug/g  $C_i$  Hg=1372.7 ug/g  $C_i$  Cd=1064.5 ug/g

	Pectina			Quitosano			Pellets		
Metal	Hg	Pb	Cd	Hg	Pb	Cd	Hg	Pb	Cd
%	15	4	4	85-100	70	75	100	100	100
pH final	4.2	4.6	4.2	6.5	6	6	7.9	7.5	7

Tabla 2- Energía Estérica (E.E.) y calores de formación calculados para las configuraciones 1, 2 y 3 intramolecular y la coordinación intermolecular de Pb, Hg y Cd (kJ/mol)

	Conf 1			Conf.2			Conf.3			Inter.		
Metal	Hg	Pb	Cd	Hg	Pb	Cd	Hg	Pb	Cd	Hg	Pb	Cd
E.E.	295	317	305	348	371	314	294	299	485	107	199	162
$-\Delta H_f$	1611	1561	1713	1548	1544	1614	2330	2313	1640	1476	1159	803

Los datos cinéticos obtenidos a 20, 40 y 60°C muestran que se obtiene 100 % de adsorción para los tres iones, a distintos tiempos de interacción al aumentar la temperatura. Mientras que para  $Hg^{+2}$  la adsorción ocurre a través de un proceso químico y electrostático, en el caso del  $Pb^{+2}$  el mecanismo involucra intercambio iónico. Se propone un mecanismo mixto para  $Cd^{+2}$ , que presenta cinéticas de adsorción sobre quitosano y pectina semejantes al  $Pb^{+2}$ . Sobre los pellets las formas de las curvas cinéticas son diferentes para los tres iones.

#### Referencias

- [1] -Debbaudt, A.; Gschaidner, M. E.; Rodriguez, M. S.; Agullo, E.; **2002**. *Proceeding 5<sup>th</sup> International Conference of the European Chitin Society*. En prensa.
- [2] -Ferreira, M. L.; Gschaidner, M. E.; **2001**. *Macromol. Biosci.*, Vol. 1, 233-248.
- [3] -Debbaudt, A. L.; Zalba, M.; Ferreira, M. L.; Gschaidner, M. E.; **2001**. *Macromol. Biosci.*, Vol. 1, 249-257.