



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
GRUPO DE FÍSICA APLICADA
Núcleo de Biocrystallografia
fismed.ufes@gmail.com

ESTUDO SOBRE A ENERGIA DE LIGAÇÃO DO $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$

L. Kuplich, J.B. Depianti, D.O. Souza, P. C. M. Cruz, E.F. Medeiros, M.T.D. Orlando
Universidade Federal do Espírito Santo

L.G. Martinez
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares- IPEN

R.P. Ortiz
Universidade de São Paulo

INTRODUÇÃO

Nosso grupo de pesquisa na UFES vem estudando, desde 1999, a composição dos cálculos renais utilizando a técnica de difração de raios X de pó.

Em nossa comunidade, o oxalato de cálcio está presente em 80% dos cálculos renais, seja na forma monohidratada ($\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ – 71%) ou na forma dihidratada ($\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ – 29%) [1].

OBJETIVO

Determinar a posição atômica da molécula de água do $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ a fim de auxiliar o tratamento da litíase renal *in vivo*.

Neste trabalho investigamos a estabilidade da molécula de água desse cristal antes e depois de submetê-los a um tratamento térmico em atmosfera inerte.

MATERIAIS e MÉTODOS

Amostras preparadas em estudo precedente.

- Secagem da amostra
- Fotografia das amostras
- Catalogação
- Moagem
- Análise de Raios-X
(Difratograma)
- Identificação da composição



ESTUDO

Tomamos 2 amostras contendo 100% de oxalato de cálcio monohidratado (OCM) e realizamos 3 tratamentos térmicos sob atmosfera inerte (N_2), da seguinte forma:

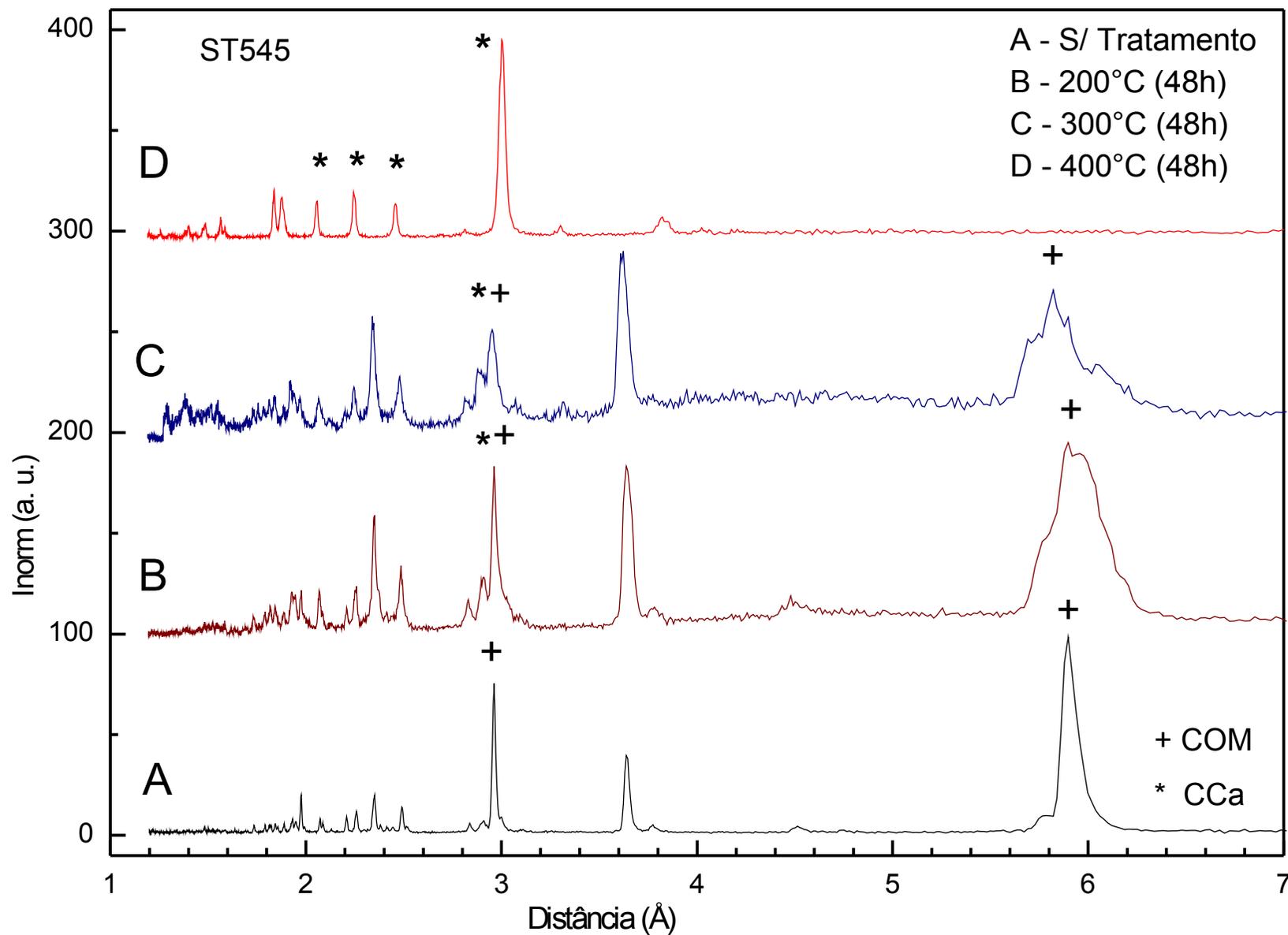
- T1- 200° C (48h);
- T2- 300° C (48h);
- T3- 400° C (48h).

Após cada tratamento:

- Novas medidas de difração de raios X de pó.
- Novas identificações dos compostos resultantes.

RESULTADOS

Evolução dos picos com o tratamento térmico



DISCUSSÃO

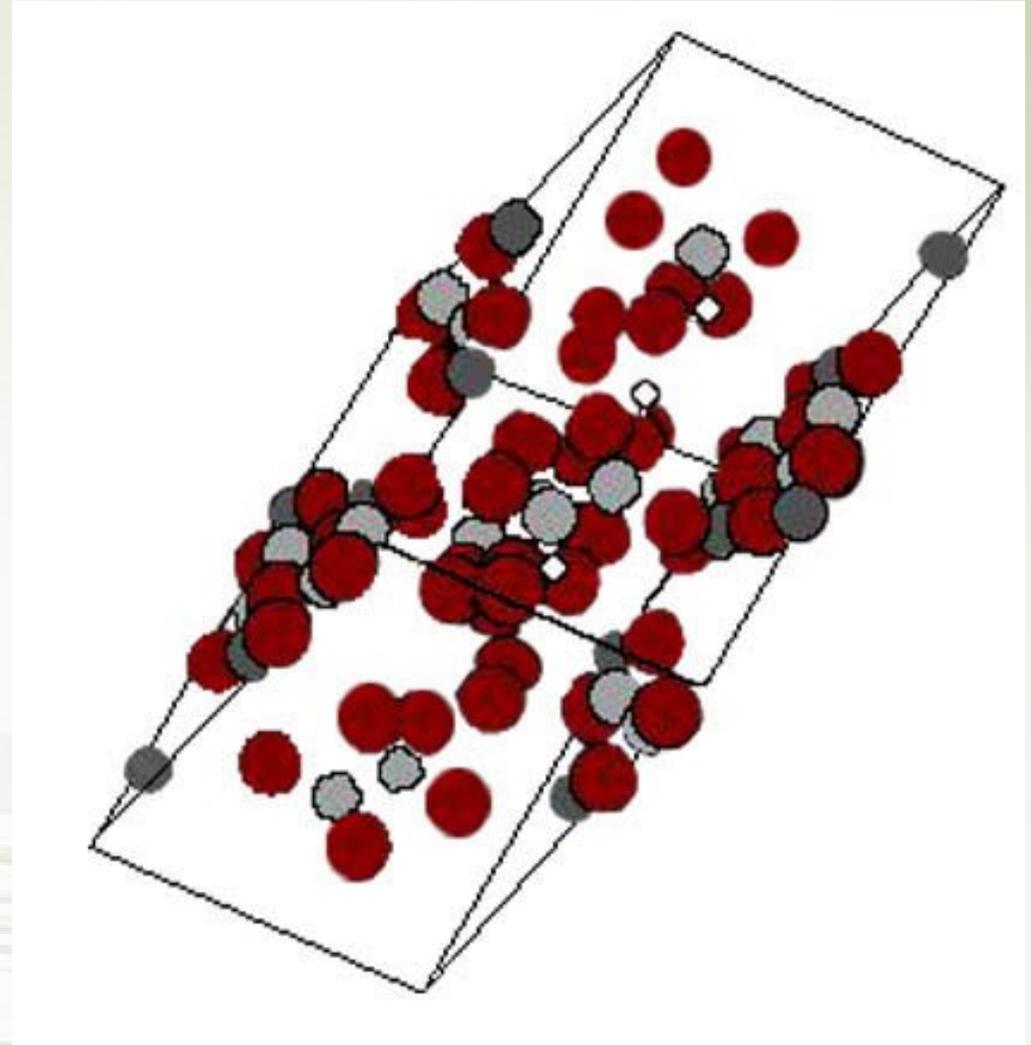
Os picos 3Å e 6Å indicam uma mudança da estrutura e composição do oxalato de cálcio monohidratado para o carbonato de cálcio.

Além disso, a estabilidade hídrica do composto só foi alterada quando fornecemos mais energia ao cristal.



CONCLUSÃO

- ✓ A total eliminação da molécula de água aconteceu em torno de 180°C como relatado na literatura [2].
- ✓ Indicando que a molécula de água se encontra “ligada” à estrutura do cristal [1].
- ✓ O cristal $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ é uma forma estável do oxalato de cálcio.



REFERÊNCIAS

[1] Kuplich, L.: *Estudos sobre o $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ presentes em pedras de rins*. 2004.135f. Dissertação (Mestrado em Física)- Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2004.

[2] Branco, C.H.D.: *Avaliação de cálculos urinários em pre-operatório por imagem digital e técnicas físico-químicas e analíticas*. Dissertação (Mestrado).[s./.]

AGRADECIMENTOS

