

## ESTUDO CINÉTICO DA DECOMPOSIÇÃO TÉRMICA DO $Mg(OH)_2$

A.M. Santos<sup>(1,2)</sup>, A.E.M. Paiva<sup>(2)</sup>, A. P. da Luz<sup>(3)</sup>, V. C. Pandolfelli<sup>(1)</sup>

1) Depto. Engenharia de Materiais – UFSCar

2) Instituto Federal de Educação do Maranhão – IFMa

3) Fundação de Apoio ao Desenv. Científico e Tecnológico - FAI

Av. Getúlio Vargas, nº 04, Monte Castelo, São Luís, MA

anamaria@ifma.edu.br

### Resumo

*O conhecimento dos parâmetros cinéticos envolvidos na reação de decomposição da brucita é fundamental para o estudo da hidratação da magnésia. Neste trabalho foram obtidos dados experimentais da decomposição térmica da brucita ( $Mg(OH)_2$ ) por meio de experimentos de termogravimetria (TG). Os ensaios dinâmicos foram executados a temperatura de 25 °C a 800 °C, aproximadamente e foram empregadas taxas de aquecimento de: 2,5; 5; 10 e 20 °C.min<sup>-1</sup>. Os parâmetros cinéticos de decomposição da brucita foram simulados por meio da termogravimetria não isotérmica em atmosfera dinâmica de ar sintético, utilizando-se análises cinéticas baseado em modelos através do software Thermokinetics (Netsch). Os resultados obtidos mostraram que o modelo cinético não isotérmico pelo método da reação na interface de duas dimensões (R2) foi a função que mais aproximou os dados experimentais e conseqüentemente refinou os parâmetros de Arrhenius.*

*Palavras-chave: brucita, parâmetros cinéticos, decomposição.*

### INTRODUÇÃO

A análise térmica vem sendo muito utilizada em diversas áreas, tais como alimentícia, catálise, cerâmica, engenharia civil, farmacêutica, inorgânica, orgânica, petroquímica, polímeros, vidros e outras para a obtenção de parâmetros cinéticos através de modelos matemáticos [1].

Nos últimos anos, várias pesquisas tem buscado entender a reação de desidroxilação por várias técnicas [2-6], sendo a Termogravimetria (TG) bastante utilizada para estudar a cinética de processos que envolvem a decomposição de sólidos e reações nas fases sólido-gás, após a perda de massa e/ou a taxa de perda de massa (DTG) das amostras com o tempo, Equação (A).



onde,  $As$  é o reagente sólido em pó inicialmente formado,  $Bs$  é o produto sólido da reação localizada sobre os grãos do reagente inicial e  $Cg$  é o produto da reação gasosa liberado para o ambiente. Este processo é referido como sendo de quase um estágio, pelo motivo que as reações do tipo da equação (A) têm, pelo menos, três estágios: estágio de reação química, de transferência de calor e de massa. No entanto, dependendo das condições experimentais, um dos estágios pode ser limitante [7].

Como alternativa, os experimentos podem ser realizados tanto por TG isotérmico em que o reagente sólido é mantido sob condições isotérmicas e os experimentos devem ser realizados em diferentes temperaturas de modo a determinar a dependência da temperatura com a taxa da reação e, por não isotérmico, onde o sólido é submetido a um aumento gradual de temperatura (normalmente linear com o tempo) para obter os parâmetros cinéticos (energia de ativação e constante pré - exponencial) e a função cinética[8-9]

Entretanto, a cinética de decomposição térmica do  $Mg(OH)_2$ , além da dependência dos fatores físico-químicos [6, 10, 11] e processuais ) [8,12-16], tem influência também da forma como foi gerado.

Para processos não isotérmicos, a taxa de uma reação no estado sólido pode ser expressa pela Equação (B)

$$\frac{d\alpha}{dt} = Ae^{-(E_a/RT)} f(\alpha) \quad (B)$$

Onde,  $A$  é o fator pré-exponencial (frequência),  $E_a$  a energia de ativação,  $T$  a temperatura absoluta,  $R$  a constante do gás,  $f(\alpha)$  a função que representa o modelo da reação, e  $\alpha$  é o fator de conversão. Para uma medida gravimétrica,  $\alpha$  é definido por:

$$\alpha = \frac{m_0 - m_t}{m_0 - m_\infty} \quad (C)$$

Onde,  $m_0$  é a massa inicial,  $m_t$  é a massa no tempo  $t$ , e  $m_\infty$  é a massa final.

Alternativamente, a velocidade da reação dada na Equação (B) pode ser transformada em uma expressão de taxa não isotérmica como função da temperatura. Nestas condições a amostra é aquecida a uma taxa constante, obtendo-se o seguinte, equação (D):

$$\beta = \frac{dT}{dt} \quad (D)$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{d\alpha}{dT} \frac{dT}{dt} = \beta \frac{d\alpha}{dT}$$

Combinando-se as equações (C) e (D), obtemos a equação (E):

$$\frac{d\alpha}{dT} = \left(\frac{A}{\beta}\right) \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) f(\alpha) \quad (E)$$

onde,  $da/dT$  é a taxa de reação não isotérmica e  $\beta$ , é a razão de aquecimento.

Integrando a equação (D), obtém-se, a equação (F):

$$g(\alpha) = \int_0^{\alpha} \frac{d\alpha}{f(\alpha)} = \frac{A}{\beta} \int_{T_0}^T \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) dT \quad (F)$$

O termo  $g(\alpha)$  representa o modelo na forma integral da reação. A integral não apresenta solução analítica, mas pode ser resolvida por uma expressão algébrica, sendo que muitas dessas expressões apresentam resultados frequentemente imprecisos, não podendo ser utilizados indiscriminadamente. Diversos trabalhos [17-22] utilizam algumas aproximações para a resolução dessa integral, usando para isto diversos modelos cinéticos para determinação dos parâmetros cinéticos utilizando técnica termo analítica. Os modelos propostos para a reação no estado sólido são: difusão, reações na fase limítrofe e de nucleação e crescimento.

A Tabela 1 mostra algumas dessas expressões utilizadas nos modelos propostos [12], onde é demonstrada a dependência do grau de conversão ( $\alpha$ ) em função do tempo ( $t$ ), para decomposições no estado sólido.

Tabela 1 - Expressões para os diversos tipos de reações [12].

model	differential form $f(\alpha) = 1/k \, d\alpha/dt$	integral form $g(\alpha) = kt$
nucleation models		
power law (P2)	$2\alpha^{1/2}$	$\alpha^{1/2}$
power law (P3)	$3\alpha^{2/3}$	$\alpha^{1/3}$
power law (P4)	$4\alpha^{3/4}$	$\alpha^{1/4}$
Avrami–Erofeev (A2)	$2(1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{1/2}$	$[- \ln(1-\alpha)]^{1/2}$
Avrami–Erofeev (A3)	$3(1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{2/3}$	$[- \ln(1-\alpha)]^{1/3}$
Avrami–Erofeev (A4)	$4(1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{3/4}$	$[- \ln(1-\alpha)]^{1/4}$
Prout–Tompkins (B1)	$\alpha(1-\alpha)$	$\ln[\alpha/(1-\alpha)] + c^a$
geometrical contraction models		
contracting area (R2)	$2(1-\alpha)^{1/2}$	$1 - (1-\alpha)^{1/2}$
contracting volume (R3)	$3(1-\alpha)^{2/3}$	$1 - (1-\alpha)^{1/3}$
diffusion models		
1-D diffusion (D1)	$1/(2\alpha)$	$\alpha^2$
2-D diffusion (D2)	$-[1/\ln(1-\alpha)]$	$((1-\alpha)\ln(1-\alpha)) + \alpha$
3-D diffusion–Jander (D3)	$[3(1-\alpha)^{2/3}]/[2(1-(1-\alpha)^{1/3})]$	$(1-(1-\alpha)^{1/3})^2$
Ginstling–Brounshtein (D4)	$3/[2((1-\alpha)^{-1/3}-1)]$	$1 - (2/3)\alpha - (1-\alpha)^{2/3}$
reaction-order models		
zero-order (F0/R1)	1	$\alpha$
first-order (F1)	$(1-\alpha)$	$-\ln(1-\alpha)$
second-order (F2)	$(1-\alpha)^2$	$[1/(1-\alpha)] - 1$
third-order (F3)	$(1-\alpha)^3$	$(1/2)[(1-\alpha)^{-2} - 1]$

<sup>a</sup> Constant of integration.

Existem duas abordagens que podem ser utilizadas para a análise cinética não isotérmica de dados termoanalíticos: análise baseada em modelo livre “model free” e análise baseado em um determinado modelo. Ambas as abordagens precisam de várias medições termoanalíticas em diferentes condições de temperatura. Entretanto, devido o método baseado no modelo livre ser muito susceptível a erros, o mais utilizado é o método baseado em modelo, mesmo com as dificuldades relacionadas com a natureza complexa dos mecanismos de reações envolvendo sólidos, ainda é o mais indicado.

A abordagem da análise cinética baseada em modelos leva em consideração três hipóteses. A primeira hipótese de que a reação acontece em várias etapas (reações elementares), e a taxa de reação de cada etapa pode ser descrita por uma equação cinética própria para esta etapa [23]. A segunda é que todos os parâmetros cinéticos como energia de ativação, fator pré-exponencial, a ordem e o tipo da reação são assumidos constantes durante a sua evolução para cada passo individual da reação [23]. A terceira é que o sinal termo analítico é a soma dos sinais das etapas de reação individuais. O efeito de cada etapa é calculado como a taxa da reação, multiplicada pelo efeito desta etapa como variação de entalpia, ou perda de massa [23].

Neste trabalho, foi utilizado o software Thermokinetics (NETZSCH) para simular os dados obtidos por TG não isotérmica através das análises cinéticas baseados em modelos mostrados na Tabela 1. Para isto é necessário escolher o tipo de função que mais se aproxima (do ponto de vista estatístico) as curvas experimentais para todas as taxas utilizadas no aquecimento. Caso o tipo de função correspondente para o processo em questão for desconhecido, o programa realiza os cálculos para todo o conjunto de funções apresentado na Tabela 1, e com base nos critérios estatísticos, a função que melhor se aproxima dos dados experimentais é selecionada. Finalmente, a escolha da função é baseada na busca do sentido físico da relação resultante (dados de literatura, resultados de outros estudos físico-químicos, ou considerações gerais com base nas teorias de processos heterogêneos) caso várias funções descrevam adequadamente os dados experimentais.

O objetivo deste trabalho foi simular por meio da termogravimetria não isotérmica em atmosfera dinâmica de ar sintético, os parâmetros cinéticos do

processo de decomposição da brucita, utilizando-se análises cinéticas baseado em modelos.

## MATERIAIS E MÉTODOS

As amostras foram preparadas com o sinter magnésia M30 < 45  $\mu$  (Magnesita Refratários S.A., Brasil), (Tabela 2). As suspensões do óxido de magnésio foram preparadas com uma relação água/MgO de 0,25 em um misturador mecânico de bancada (Ética Equipamentos Científicos S.A.), rotação de 200 rpm por 2 min. Para o processo de hidratação, as suspensões de MgO foram colocadas em moldes poliméricos inertes, e mantidos em uma câmara climática (Vötsch 2020), por 7 dias, a 50°C, e umidade relativa de 80%.

Tabela 2. Propriedades físico-químicas e composição do sinter de magnésia.

Fonte de MgO	Sinter de magnésia - SM	
Propriedades físico-químicas	Área Superficial ( $m^2/g$ )	1,05
	Diâmetro médio ( $D_{50}$ , $\mu m$ )	7,76
	Densidade ( $\rho$ , $g/cm^3$ )	3,53
Composição (%-p)	MgO	98,17
	CaO	0,84
	SiO <sub>2</sub>	0,33
	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,12
	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,41
	MnO	0,13
	CaO/SiO <sub>2</sub>	2,54

As análises termogravimétricas (TG) para o estudo cinético de decomposição do Mg(OH)<sub>2</sub>, foram obtidas em um analisador térmico simultâneo (NETZSCH STA 449F3), sob atmosfera dinâmica de ar sintético (N<sub>2</sub> = 80% e O<sub>2</sub> = 20%, vazão de 50 mL.min<sup>-1</sup>). Os ensaios dinâmicos foram executados a temperatura da ambiente até 800 °C aproximadamente e foram empregadas as seguintes taxas de aquecimento: 2,5; 5; 10 e 20 °C.min<sup>-1</sup>.

Para o estudo cinético, foi utilizado o software Thermokinetics (v 3.0) da Netzsch. A interface entre as medidas realizadas e o Programa Thermokinetics são arquivos do tipo ASCII. Este software é de grande importância, pois nele podem ser usados arquivos ASCII criados em aparelhos da Netzsch ou em aparelhos de outros fabricantes, como por exemplo, TA Instruments, Mettler Toledo, Perkin Elmer, entre

outros, e devem conter dados como (massa da amostra; descrição das colunas; tempo (s ou min) e temperatura (°C ou K), temperatura inicial e taxa de aquecimento; sinais DSC: fluxo de calor em mW ou mW/mg; TG: massa em mg ou %).

O número de pontos que caracterizam a faixa de interesse da curva a ser analisada não deve ser menor que 400. O mais indicado estaria na faixa de 800 a 4000 pontos, sendo o número máximo de pontos igual a 500000. O uso deste software possibilita um estudo de medidas dinâmicas, isotérmicas e a combinação de ambas. A base para determinação dos parâmetros cinéticos usando o software Thermokinetics deve ter no mínimo três varreduras da mesma amostra, com razões de aquecimento diferentes. Um número maior de varreduras aumenta a precisão dos parâmetros obtidos.

A simulação com o software Thermokinetics foi testada com os modelos de reação química generalizada de enésima ordem (Fn), de acordo com Prout-Tompkins de ordem n autocatalítica (Bna), de enésima ordem com autocatálise (Cnb) e área contratante (R2). As equações (G, H, I e J) representam esses modelos, respectivamente.

Reação química generalizada de enésima ordem:

$$f_{\alpha} = (1 - \alpha)^n \quad (G)$$

Prout-Tompkins de enésima ordem autocatalítica:

$$f_{\alpha} = \alpha^n (1 - \alpha)^n \quad (H)$$

Enésima ordem com autocatálise:

$$f_{\alpha} = (1 - \alpha)^n (1 + K_{catal}X) \quad (I)$$

Onde X é um componente no modelo complexo

Área contratante:

$$f_{\alpha} = 2(1 - \alpha)^{1/2} \quad (J)$$

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 1 apresenta as curvas de TG e DTG obtidas na razão de aquecimento de 10 °C/min para a decomposição do hidróxido de magnésio. A curva de TG apresenta uma perda total de massa igual a 16,93% que é maior do que a perda de massa calculada (15,52%) atribuída para a desidroxilação completa de  $Mg(OH)_2$ . O excesso de perda de massa (1,41%) pode ser atribuído às impurezas.

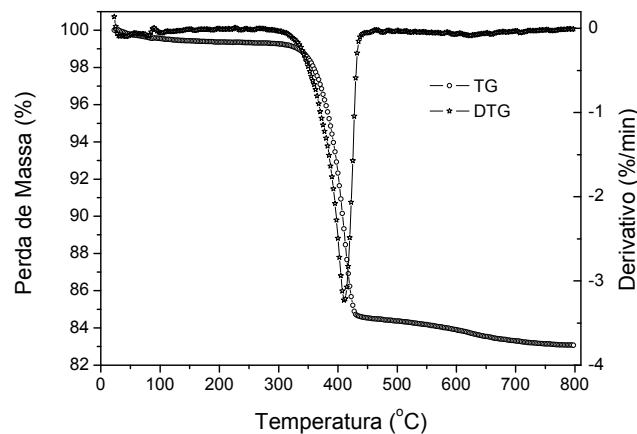


Figura 1- TG e DTG de decomposição da brucita na razão de aquecimento de 10 °C/min.

As análises baseadas em modelos requerem pelo menos três curvas dinâmicas com diferentes razões de aquecimento. Neste trabalho foram utilizadas as quatro razões de aquecimento para as análises.

A Figura 2 mostra a curva de TG das amostras de brucita para as quatro razões de aquecimento.

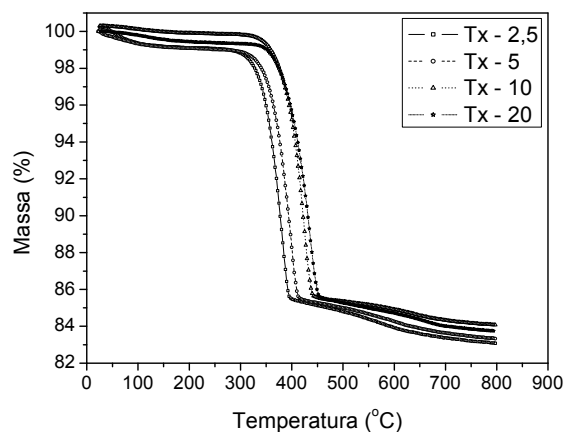


Figura 2 - Curvas termogravimétricas experimentais para o hidróxido de magnésio, a taxas de aquecimento de 2,5; 5; 10 e 20°C.min<sup>-1</sup>.

Independentemente da taxa de aquecimento, ficou constatada que a reação de decomposição térmica se processou em um único evento. Numa primeira análise, foram verificadas que as curvas de TG mostram uma não dependência da perda de massa em função da taxa de aquecimento conforme pode ser visto na Fig. 2. Isto é típico da não ocorrência de modelos cinéticos ramificados. Conforme era previsto, observa-se na Fig. 2, a ocorrência de um pequeno deslocamento no perfil das curvas TG à medida que a razão de aquecimento é aumentada. Pode-se observar que quanto maior for a taxa de aquecimento, a distribuição de calor na amostra será menos uniforme, deslocando a curva de TG para maiores temperaturas.

Para se determinar os parâmetros cinéticos pelo método baseado em modelos, avaliaram-se primeiramente os graus de conversão de um determinado evento com base na Equação C.

A Figura 3 mostra as curvas de decomposição térmica do óxido de magnésio em função da temperatura de calcinação, submetidos a diferentes taxas de aquecimento para as funções baseados nos modelos R2, Fn, Cn B e Bna.

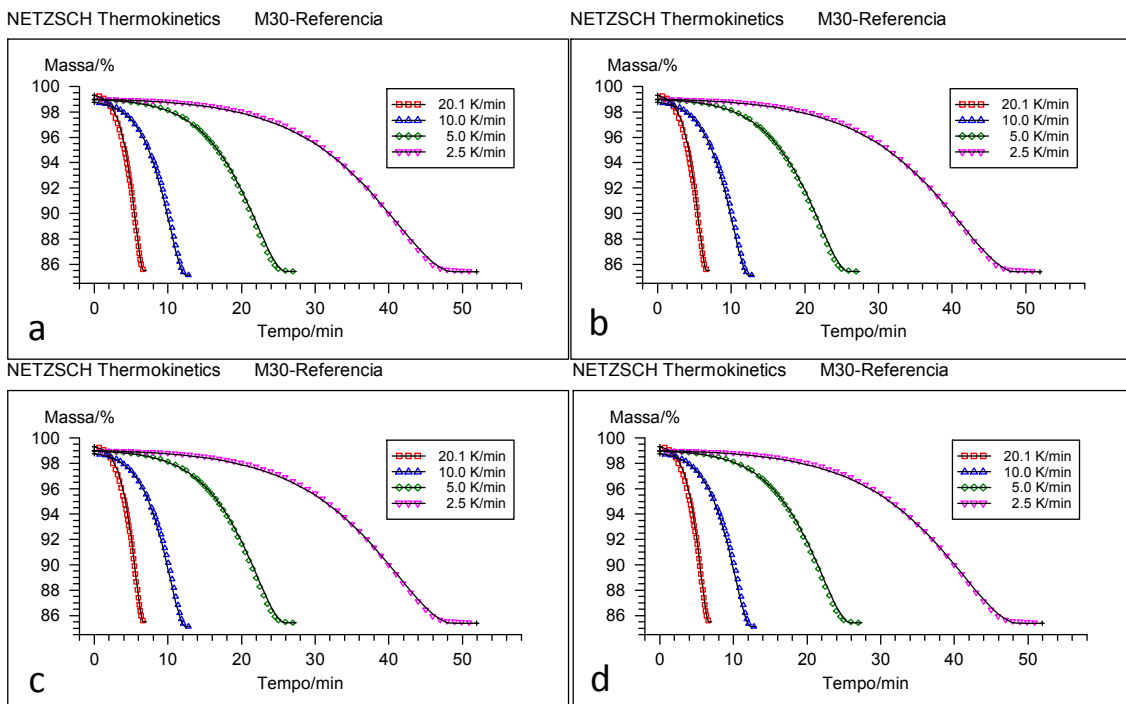


Figura 3 - Comparação entre simulação (linhas) e perda de massa experimental (símbolos) durante a decomposição da brucita em quatro diferentes taxas de aquecimento para os modelos: (a) R2, (b) Fn, (c) Cn B e (d) Bna.

Pode-se observar que as taxas de aquecimento durante o processo de decomposição térmica do hidróxido de magnésio apresentam efeitos significativos



na taxa de decomposição térmica do hidróxido de magnésia. É observado na Fig. 3 que as taxas de aquecimento mais lentas, a temperatura máxima de calcinação pode ser reduzida.

A Figura 4 apresenta as características da função que melhor ajusta os resultados experimentais (a partir do ponto de vista estatístico) obtidos pelo software Thermokinetics (v 3.0) da Netzch e da simulação dos modelos apresentados na Tabela 1. Para a reação em questão, a função de melhor ajuste é a Reação na Interface bidimensional (código R2), o que é indicado no topo esquerdo da tabela da Figura 4.

#	Code	Fexp	Fcrit(0.95)	f-act	Type 1	Type 2	Type 3	Type 4	Type 5
0	s:	1.00	1.26	209	R2				
1	s:	1.00	1.26	208	Fn				
2	s:	1.00	1.26	208	Cn B				
3	s:	1.01	1.26	207	Bna				
4	s:	1.55	1.26	209	R3				
5	s:	1.77	1.26	208	C1 B				
6	s:	2.39	1.26	208	An				
7	s:	5.15	1.26	209	F1				

Figura 4: Qualidade do ajuste para diferentes modelos.

Para realizar tal análise, o teste exato de Fisher foi usado. Em geral, o teste de Fisher é uma razão de variância que torna possível verificar se a diferença entre duas estimativas independentes da variância de algumas amostras de dados é significativa. Para isto, a proporção destes dois desvios é comparada com os correspondentes valores tabulados da distribuição de Fisher para um dado número de graus de liberdade e nível de significância. Se a relação de dois desvios excede o correspondente valor teórico do teste de Fisher, a diferença entre as variâncias é significativa.

A Figura 4 também mostra que quatro modelos atende a essa exigência: a equação na Interface bidimensional (R2), a equação de ordem n (Fn), a equação de enésima ordem com autocatálise (Cn b) e a equação Prout-Tompkins de enésima ordem com autocatálise (Bna) (Tab. 1). Para descrever entre estas funções, um cálculo de regressão não linear é executado para cada função separadamente sob o

pressuposto de um processo de uma etapa. Assim, a Tabela 3 apresenta o conjunto de parâmetros cinéticos e seus erros obtidos experimentalmente para a reação de decomposição da brucita para todas as funções estatisticamente equivalentes.

Tabela 3: Parâmetros cinéticos obtidos experimentalmente para a reação de decomposição da brucita por diferentes métodos.

Modelos	R2	Fn	Cn B	Bna
E1 kJ/mol	136.26 ± 0.61	136.00 ± 0,74	136.00 ± 1.04	136.01 ± 1.45
log A1/s <sup>-1</sup>	7.80 ± 0.05	8.08 ± 0.05	8.08 ± 0.08	8.08 ± 0.11
React.ord. 1		0.49 ± 0,03	0.49 ± 0.03	0.49 ± 0.05
Exponent a1			-	6.48E-6 ± 0.03
log Kcat 1			-4.00 ± 0.00	-
R <sup>2</sup>	0.999117	0.999118	0.999118	0.999118

Na Tabela 3, observa-se que dos parâmetros autocatalíticos (exponente a1 e log Kcat), somente o expoente a1 da função Bna é próximo de zero, ou seja, esta função se reduz à função Fn. Também, foi observado que os erros dos parâmetros de Arrhenius (E1 e log A1/s<sup>-1</sup>) das funções R2, Fn e Cn B, os da função R2 apresentam o menor valor. Desta forma, a decomposição da brucita é melhor descrita pela função R2.

Os resultados apresentados na Tab. 3 e na Fig. 4 mostraram que os modelos utilizados predisseram os dados experimentais das curvas de TG para a brucita. O modelo de equação na interface bidimensional (R2), devido a melhor correlação dos dados obtidos com menores erros, foi o que melhor representou os dados de TG experimentais. Assim, pode-se usar o modelo R2 para controlar a decomposição da amostra de brucita utilizada neste trabalho, proveniente de MgO hidratado que obedece aos parâmetros com credibilidade.

## CONCLUSÕES

Neste trabalho foi investigada a decomposição térmica da brucita que se mostrou tratar-se de uma reação endotérmica. A energia de ativação foi determinada empregando os métodos de Interface bidimensional (R2), a equação de ordem n (Fn), a equação de enésima ordem com autocatálise (Cn b) e a equação Prout-Tompkins de enésima ordem com autocatálise (Bna). Nos métodos foram obtidos diferentes valores, de energia de ativação dependendo do modelo cinético utilizado:

136.26 kJ.mol<sup>-1</sup> para o R2, 136.00 kJ.mol<sup>-1</sup> para o Fn, 136.00 kJ.mol<sup>-1</sup> para o Cn B e 136.01 kJ.mol<sup>-1</sup> para o Bna. Todos os modelos testados descreveram bem o comportamento da cinética da brucita, o coeficiente de correlação foi superior a 0.99911. Entretanto, o melhor resultado foi obtido com o modelo de Interface bidimensional (R2), pois apresentou menores erros nos parâmetros cinéticos. Os parâmetros cinéticos obtidos neste trabalho podem ser usados para auxiliar a descrever o processo de decomposição da brucita e entender melhor o método de hidratação da magnésia, que é uma matéria-prima promissora para aplicação em refratários.

## REFERÊNCIAS

- [1] GAM PD. et al., Thermal Methods of analysis: principles, applications and problems, Blackie Academic and Professional, England, 1995.
- [2] NAHD, K., ROQUEROL, F., AYADI, M.T. Mg(OH)<sub>2</sub> dehydroxylation: a kinetic study by controlled rate thermal analysis (CRTA), Solid State Sci. v.11, p.1028-1034, 2009.
- [3] BHATTI, A.; DOLLIMORE, D. DYER, A. Decomposition kinetics of magnesium hydroxide using DTA, Thermochim. Acta, v.78, p.55-62, 1984.
- [4] HALIKIA, I.; NEOU-SYNGOUNA, P.; KOLITSA, D. Isothermal kinetic analysis of the thermal decomposition of magnesium hydroxide using thermogravimetric data, Thermochim. Acta v.320, P.75-88, 1998.
- [5] L'VV, B.V.; NOVICHIKHIN, A.V.; DYAKOV, A.O. Mechanism of thermal decomposition of magnesium hydroxide, Thermochim. Acta v.315, p.135-143, 1998.
- [6] PFEIFFER, H., Thermal analysis of the Mg(OH)<sub>2</sub> dehydroxylation process at high pressures, Thermochimica Acta v.525, p180-182, 2011.
- [7] ARKHANGEL'SKII, I.V.; DUNAEV, A.V.; MAKARENKO, I.V.; TIKHONOV, N.A.; BELYAEV, S.S; TARASOV, A.V. Non-isothermal kinetic methods, workbook and laboratory manual, Edition Open Access 2013, <http://www.edition-open-access.de>.
- [8] MACIEJEWSKI, M. Thermochim. computational aspects of kinetic analysis-Part B: The ICTAC kinetics project — the decomposition kinetics of calcium carbonate revisited, or some tips on survival in the kinetic minefield. Thermochim. Acta, v.355, 145-154, 2000..
- [9] SE&K. J. Thermophysical Properties of solids (their measurement and theoretical thermal analysis), Academia Prague, Prague, 1984.
- [10] HRAB, Z.; SVETIK, S., The influence of water vapour on decomposition of magnesite and brucite, Thermochimica Acta, v.92, p.653-656, 1985.
- [11] OLEG, S. POKROVSKY, JACQUES SCHOTT; ALAIN, C., Kinetics of brucite dissolution at 25°C in the presence of organic and inorganic ligands and divalent metals, Geoch. et Cosmochimica Acta, v.69,n. 4, pp. 905–918, 2005.
- [12] KHAWAM, A.; FLANAGAN, D. R. Solid-State kinetic models: basics and mathematical fundamentals, J. Phys. Chem. B, v.110, n.35, p.17315-17328, 2006.
- [13] READING, M.; DOLLIMORE, D.; WHITEHEAD, R. J., Controlled Rate Thermal Analysis and Related Techniques. Therm. Anal, v.37, p.2160-2165, 1991.

- [14] POKOL, G.; GA'L, S.; PUNGOR, E. The effect of heat transport within the sample on the shape of thermoanalytical curves, *Thermochim. Acta*, v.105, p.313-331, 1986.
- [15] MACIEJEWSKI, M.; RELLER, A. How (un)reliable are kinetic data of reversible solid-state decomposition processes. *Thermochim. Acta*, v.110, p.145-152, 1987.
- [16] CEIPIDOR, U.B.; BUCCI, R.; MAGRI, A.D. Using thermoanalytical data: Part 3. Influence of calorimetric and instrumental parameters on estimating kinetic parameters by TG. *Thermochim. Acta*, v.199, P.77-82, 1992.
- [17] LEIVA, C.R.M.L.; CRNKOVIC, P. M.; SANTOS, A. M. O Emprego da termogravimetria para determinar a energia de ativação do processo de combustão de óleos combustíveis. *Quim. Nova*, v.29, n. 5, p.940-946, 2006.
- [18] LI, C.R.; TANG, T. B. A new method for analyzing non-isothermal thermoanalytical data from solid-state reactions. *Thermoch. Acta*, n.325, p.43-46, 1999.
- [19] PIELICHOWSKI, K., TOMASIK, P., SIKORA, M. Uso de programa computacional aliado às técnicas de análise térmica para determinação de parâmetros cinéticos de compósitos de PU/fibra de curuá. *Carbohydrate Polymers*. v.3, p.49-54, 1998.
- [20] SALVADOR, A. R.; CAVALO, E.G., Kinetic analysis of non-isothermal solid decomposition reactions. An approach to the treatment of experimental data, *Thermochemica Acta*, v.203, p. 67-76, 1992.
- [21] ORFÃO, J.J.M.; MARTINS, F.G. Kinetic analysis of thermogravimetric data obtained under linear temperature programming - a method based on calculations of the temperature integral by interpolation, *Thermoch. Acta*, v.390, p.195-211, 2002.
- [22] BHATTI, A.; DOLLIMORE, D. Decomposition kinetics of magnesium hydroxide using DTA, *Thermochemica Acta*, v.78, p.55-62, 1984.
- [23] MOUKHINA, E. Determination of kinetic mechanisms for reactions measured. *J Therm Anal Calorim*, v.109, p. 1203-1214, 2012.

## KINETIC STUDY OF THE THERMAL DECOMPOSITION OF $Mg(OH)_2$

### Abstract

*The knowledge of the kinetic parameters involved in the decomposition reaction is fundamental for the hydration magnesia study. In this work experimental data of the thermal decomposition were obtained by means thermogravimetry experiments (TG). The dynamic tests were performed to a temperature of 25 °C to 800°C approximately and heating rates were employed: 2.5; 5; 10 and 20 °C min<sup>-1</sup>. The kinetic parameters were simulated by means of Thermogravimetry isothermal not in dynamic synthetic air atmosphere, using kinetic analyses based on models through software Thermokinetics (Netsch). The results obtained showed that the non-isothermal kinetic model by the method of the reaction at the interface of two dimensions (R2) was the function that more approached the experimental data and subsequently refined the Arrhenius parameters.*

*Key Words: brucite, kinetic parameters, decomposition*