ESTUDO TÉRMICO E ESTEREOQUÍMICO DO ACETATO DE URANILO DI-HIDRATADO

THERMAL STUDY AND STEREOCHEMICAL OF THE DI-HYDRATED URANYL ACETATE

COSTA, Luiz Henrique Medeiros da^{1*}; LIMA, Francisco José Santos²;
SILVA, Ademir Oliveira da³

^{1,2,3}Universidade Federal do Rio Grande do Norte – UFRN
Av. Senador Salgado Filho s/n, Campus Universitário – CEP 59072-970

*Autor correspondente
e-mail: medeiroslhc@hotmail.com

Received 04 January 2015; received in revised form 23 January 2015; accepted 26 January 2015

RESUMO

Pode-se inferir que quanto maior a interação, maior é a temperatura de saída da espécie, a Podemos inferir a intensidade da interação dessas espécies através da temperatura de decomposição. Realizamos a modelagem molecular para visualizar melhor o ambiente químico em torno do urânio e avaliar dados estereoquímicos do composto estudado. Através da modelagem, associamos as distâncias de ligações com a força das interações entre os átomos e entre as moléculas, sendo mostrada uma proporção inversa entre distância de ligação e energia necessária para decompor a espécie, ou seja, quanto maior a distância, menor a temperatura de decomposição. Correlacionamos também a modelagem molecular, com as temperaturas de quebra de ligação. Com os resultados das análises térmicas podemos observar que ocorreram dois eventos. No primeiro evento, ocorreu numa variação de temperatura entre 84 - 163 °C (com um pico de temperatura em 121 °C) e houve uma perda de massa de 7,982%, que está relacionado à saída de duas moléculas de água. Já no segundo evento, observou-se uma perda de massa de 24,503%, na qual foi atribuída a saída dos acetatos, que estão coordenados ao o íon urânio.

Palavras-chave: *Análise térmica, acetato de urânio di-hidratado, estereoquímica*

ABSTRACT

In our studies we can infer the intensity of the interaction of these species through the decomposition temperature. It is believed that the greater the interaction, a higher outlet temperature. We performed molecular modeling to better visualize the chemical environment around the uranium and evaluate stereochemical data of the studied compound. Through modeling, we associate the distances connections with the strength of interactions between atoms and between molecules and is shown an inverse ratio bond distance and energy required for decomposing the species, in other words, the greater the distance, the lower the temperature decomposition. Also correlated to molecular modeling with bond breaking temperatures. With the results of thermal analysis we can see that there were two events. The first event occurred at a temperature varying between 84-163 °C (with a peak temperature of 121 °C) and there was a weight loss of 7.982%, which output is related to two water molecules. In the second event, there was a mass loss of 24.503%, which was assigned the output of acetates, which are coordinated to the uranyl ion.

Keywords: *Thermal analysis uranyl, acetate dihydrate, stereochemistry*

INTRODUÇÃO

O propósito do trabalho é avaliar o estudo térmico do acetato de uranila dihidratado e correlacionar com sua estrutura molecular. A associação dessas técnicas permite diferenciar os tipos de interação das moléculas de água presentes em sua estrutura, se estão fisicamente ligadas ou quimicamente ligadas, bem como, mostrar uma proposta de decomposição do íon acetato ligado ao íon uranilo, apoiado em referências bibliográficas e modelagem molecular. Durante os estudos térmicos notamos que normalmente os primeiros eventos são as saídas das águas. Podemos inferir a intensidade da interação dessas espécies através da temperatura de decomposição. Admite-se que quanto maior a interação, maior é sua temperatura de saída. Associando com informações da literatura, através da técnica do monocristal, podemos observar entre os diferentes tipos de interação das moléculas de água com o acetato de uranilo.

1.1 Análise termogravimétrica (TGA)

É uma das técnicas analíticas que mede a perda/ganho de massa da amostra em função da temperatura ou tempo. Já a termogravimetria é um arranjo matemático para demonstrar a variação de massa em relação à variação do tempo, ou seja, matematicamente falando é a primeira derivada da TGA, podendo ser representada por DTG. As técnicas térmicas têm grande potencial e vem sendo utilizadas em diversas aplicações. Alguns materiais estudados como: materiais biológicos, cerâmicas, vidros, compostos inorgânicos, cristais líquidos, entre outros, têm sido vastamente estudados e caracterizados. Os estudos termoanalíticos desses materiais podem ser aplicados, respectivamente na determinação de constantes térmicas, estabilidades térmicas, caracterização de materiais, entre outras aplicações. (DENARI e CAVAHEIRO 2012)

De acordo com CLOUGH (CLOUGH, *et al.*, 1969), a decomposição térmica do acetato de uranilo tem estudos breves. Descobriu-se que o sal dihidratado era estável até 100°C, o qual inicialmente elimina água de cristalização. Após esse evento, ocorre a decomposição do acetato, segundo HOWATSON e GREV (HOWATSON, J. e GREV, D. M., 1975), que se encontra também

coordenado ao íon uranilo (UO_2^{+2}), segundo medidas de condutância efetuadas por LIMA, *et al.* (2014). Sugere também, que ao final da decomposição, há um pequeno aumento de peso, e isso se deve ao fato de ser analisado em atmosfera de ar, do qual o composto sofre oxidação, originando o óxido U_3O_8 . Nakagawa e col., (NAKAGAWA *et al.*, 1987), estudaram com detalhes, o comportamento das águas de hidratação de compostos com picratos de lantanídeos por análise térmica. Concluíram que os lantanídeos leves (La-Gd) eram undecahidratados enquanto que os pesados (Tb-Lu) eram octahidratados. Observaram também que haviam dois tipos diferentes de água de hidratação ligados na estrutura do complexo. Para os leves, uma fracamente ligada que inicialmente saía a uma temperatura de 30°C, com um pico endotérmico a 50°C, causando uma significativa perda de massa, e um segundo pico, também endotérmico, que aparecia a 90°C, com perda de massa associada menor. Picratos de Sm, Eu e Gd apresentaram um pico adicional endotérmico a 140°C nas curvas TG. Dy e Yb, apresentaram dois picos em 55 e 85°C, com intensidades invertidas (endo- e exotérmicas), indicando que há dois tipos de água ligadas diferentemente. Uma fracamente ligada que poderia ser removida com SiO_2 seco ou por aquecimento um pouco a cima da temperatura ambiente e outra ligada mais fortemente, sendo removida por P_2O_5 sêco sob vácuo ou aquecendo entre 90-140°C. Em outro trabalho, Matos (MATOS *et al.*, 1990) observaram que os mesmos compostos obtidos a partir de outra rota de síntese, perdiam inicialmente todas as moléculas de água, através de um processo endotérmico até aproximadamente 150°C, temperatura na qual eram obtidos os compostos anidros, que permaneciam estáveis até 300°C.

1.2 Modelagem Molecular

A modelagem molecular compreende um número de ferramentas e métodos computacionais e teóricos que tem como objetivo entender e prever comportamento de sistemas reais. Além de fornecer dados estruturais, os cálculos teóricos são usados também na análise de propriedades químicas e farmacológicas, e são aplicáveis

tanto a átomos isolados como em biomacromoléculas (RODRIGUES, 2001).

Realizamos a modelagem molecular para visualizar melhor o ambiente químico em torno do urânio e avaliar dados estereoquímicos do composto estudado.

O interesse em modelagem molecular utilizando recursos computacionais vem aumentando em função do melhor desempenho apresentado pelos computadores nas últimas duas décadas. A modelagem molecular atualmente está sendo amplamente aplicada na interpretação de resultados experimentais e na construção de novos materiais com propriedades específicas. (COELHO *et. al.*, 1997)

A base da modelagem molecular está em relacionar todas as propriedades moleculares importantes, ou seja, estabilidade, reatividade e propriedades eletrônicas com a estrutura molecular. Desta forma é possível desenvolver algoritmos capazes de calcular uma estrutura molecular com uma estereoquímica específica e correlacioná-la com as propriedades moleculares apresentadas pela substância. (COELHO. *et. al.*, 1997)

O reconhecimento desta nova área de pesquisa pelo mundo científico veio com o prêmio Nobel em Química de 1998 concedido a John Pople e Walter Kohn, pelas contribuições no desenvolvimento da química computacional e modelagem molecular (FREITAS, 1998; SANTOS, 2001).

1.3 Cristalografia: um breve histórico

Quando se fala em raios-x, a primeira aplicação que vem à mente da maioria das pessoas é a radiografia, processo que usa os raios-x para visualizar o interior de objetos (ou de pessoas) ao colocá-los entre uma fonte de raios-x e uma chapa fotográfica. De fato, essa é a mais comum das aplicações desse tipo de radiação e a primeira a ser utilizada desde a descoberta desses raios. Porém, devido ao fenômeno da *difração* de raios-x, é possível estudar materiais a nível atômico, descobrindo e estudando sua

estrutura. (AZÁROFF, 1968; CULLITY, 1956)

O físico alemão Wilhelm Conrad Röntgen passou a investigar os chamados “raios catódicos” (nome utilizado na época para designar o fluxo de elétrons gerado no tubo) em 1894, e em 1895 Röntgen descobriu os raios X, os quais imediatamente mostraram ser uma excelente ferramenta nos diagnósticos médicos. Porém levaria mais de uma década para que a radiação X e sua interação com átomos e moléculas fossem estudadas pelos físicos e levassem à elucidação da estrutura de materiais orgânicos e inorgânicos. (MARTINS, 1998; WARREN, 1969)

Em 1912, Max von Laue provou que um cristal atravessado por um feixe colimado de raios X provocava efeitos de difração. A imagem captada numa placa de filme perpendicular à direção de incidência revelava a simetria e a perfeição de uma rede cristalina. Essa experiência abriu caminho para o uso dos raios X como ferramenta fundamental no estudo dos materiais, e mereceu o prêmio Nobel de Física de 1914 (BLEICHER, 2000).

Dos experimentos de Röntgen, Laue sabia que o comprimento de onda dos raios-X era da ordem de 10^{-8} cm. Logo, um cristal serviria como uma grade ideal para a difração dos raios-x. Experimentos foram feitos para detectar o fenômeno, e em 1912 Laue conseguiu obter o primeiro diagrama de difração, utilizando o sulfato de cobre. Aplicando seus conhecimentos sobre a difração da luz por grades de uma e duas dimensões, Laue formulou uma teoria de difração de raios-X para estruturas tridimensionais (cristais), obtendo assim o prêmio Nobel de Física em 1912 (MARTINS, 1998; TORRIANI, 2014).

METODOLOGIA

A metodologia para análise do sal complexo (MERCK) foi por três técnicas: análise térmica, modelagem molecular e cristalografia. Foi feita uma relação entre as distâncias das ligações, temperatura de decomposição, estereoquímica e a cristalografia. Essas relações nos pôde abstrair informações, no que diz respeito à força de ligação, associada à ligação coordenada ao metal e a interação intermolecular da água de

hidratação. A modelagem foi baseada na literatura, onde se mostra, não somente, as distâncias de ligações como também os ângulos e a estrutura (HOWATSON, 1975).

2.1 Análise Térmica

Foi realizada a análise térmica do acetato de urânio (MERCK), utilizado em nossas pesquisas preliminares. As curvas termogravimétricas foram registradas em uma termobalança Shimadzu TGA-50H com razão de aquecimento de $10\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}^{-1}$ sob atmosfera dinâmica de ar, permitindo obter a composição e a estabilidade de compostos intermediários e resíduos. O estudo da análise térmica foi dividido em dois eventos: o primeiro relativo à perda de duas moléculas de água e o segundo, a decomposição do acetato, que está coordenado ao íon urânio. A Tabela 01 ilustra alguns dados relevantes no estudo de análise térmica.

2.2. Modelagem Molecular

A Modelagem Molecular compreende um número de ferramentas e métodos computacionais e teóricos que tem como objetivo entender e prever comportamento de sistemas reais. Além de fornecer dados estruturais, os cálculos teóricos são usados também na análise de propriedades químicas e farmacológicas, e são aplicáveis tanto a átomos isolados como em bio-macromoléculas (RODRIGUES, 2001). Realizamos a modelagem molecular para visualizar melhor o ambiente químico em torno do urânio e avaliar dados estereoquímicos do composto estudado, conforme a Figura 2.

2.3. Cristalografia

Com base nas informações da literatura, (HOWATSON, 1975), a recristalização do acetato de urânio dihidratado foi realizada da seguinte forma: o cristal foi obtido pelo método da recristalização a partir da dissolução do sal em ácido acético 3M.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

No estudo da modelagem molecular, segundo a literatura (HOWATSON, 1975), a microsimetria em torno do urânio no $\text{UO}_2(\text{H}_3\text{CCOO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, apresenta no plano equatorial, coordenação através de dois átomos

de oxigênio de um ânion acetato bidentado, dois oxigênios em dois ânions acetatos monodentados (sendo que um dos ânions pertence à célula unitária vizinha) e um oxigênio de uma molécula de água. A segunda molécula de água está ligada por interação intermolecular com a primeira, e interage também através de ligações de hidrogênio com átomos de oxigênio dos acetatos bidentados de duas células adjacentes. Há também no plano axial, dois oxigênios (um abaixo e outro acima do plano equatorial), conforme ilustra a modelagem observada na Figura 2. São mostradas, também, as distâncias de ligação entre os átomos. Podemos observar, no plano equatorial, a distância entre o oxigênio que possui uma dupla ligação com o carbono da carbonila é de $1,26\text{ \AA}$, sendo a menor distância mostrada, por ser uma ligação dupla. Observa-se também a distância entre o oxigênio do acetato bidentado e o metal que é de $2,45\text{ \AA}$. Já entre o oxigênio do acetato monodentado e o urânio, é de $2,37\text{ \AA}$. E por fim, nesse plano, a distância entre o oxigênio da água de coordenação e o átomo central é de $2,34\text{ \AA}$. No plano axial, os oxigênios possuem uma distância similar, sendo $1,74\text{ \AA}$ (acima do plano equatorial) e $1,76\text{ \AA}$ (abaixo do plano equatorial), por fim, a distância entre o oxigênio da água de cristalização com o hidrogênio da água de coordenação, sendo a maior distância mostrada, representada por $2,60\text{ \AA}$, pois se trata de uma ligação de hidrogênio ($\text{H}^{\delta+} \cdots \text{O}^{\delta-}$), forte, o suficiente para estar agregada a célula unitária. Assim, o urânio se encontra numa estrutura com número de coordenação 7 ($\text{NC} = 7$). A Figura 2 mostra os dados relativo às distâncias de ligação, citada acima.

Podemos associar as distâncias de ligações com a força das interações entre os átomos e entre as moléculas. Sabemos que a água de hidratação possui a maior distância, assim, ela é a primeira molécula a sair, durante a decomposição (Figura 3). Já a água de coordenação possui uma distância de ligação menor que a água de hidratação e que a distância entre o oxigênio do acetato monodentado. Porém, a água coordenada é perdida no primeiro evento da curva térmica. Seria mais coerente à saída do acetato monodentado, por ter uma distância de ligação um pouco maior, no entanto, é necessário lembrar que esse acetato é proveniente de uma célula unitária vizinha, e a força da ligação não depende unicamente da distância, como também

da natureza dos elementos adjacentes, tornando assim a interação do grupo orgânico mais forte. Além disso, a espécie molecular orgânica em questão, interage também com o metal da célula unitária vizinha. Assim, como a água de coordenação está apenas interagindo com o urânio e também com a água de hidratação, torna-se uma interação mais fraca que a espécie aniônica, o acetato monodentado.

Os estudos da literatura pesquisada sobre a decomposição térmica de complexos dihidratados (SILVA *et al.*, 2010; ROSSO *et al.*, 2005; MÜLLER *et al.*, 2014), mostram que o primeiro evento está diretamente ligado a saída das águas, sendo válido tanto para o acetato de zinco dihidratado quanto para o cloreto de cobre II dihidratado complexado com o aspartame. Evidencia-se também que o próximo evento, é a perda das demais espécies, os acetatos e o aspartame. Podemos citar nesses estudos térmicos que, os exemplos dos sais de ferro hidratados (cloreto e nitrato férrico), estudados por SILVA, ROSSO e MÜLLER (SILVA *et al.*, 2010; ROSSO *et al.*, 2005; MÜLLER *et al.*, 2014), são similares aos complexos citados neste trabalho. Primeiro há uma perda de massa de 7,982%, que ocorre no intervalo de 84 - 163 °C (com um pico em 121 °C) e está associado à perda de duas moléculas de água (CLOUGH *et al.*, 1969). Podemos inferir que a água de cristalização sai numa temperaturas mais baixa, antes de 100°C, atribuindo assim uma interação intermolecular mais fraca, que a da água de coordenação. Segundo a literatura (HOWATSON, 1975), a análise da estrutura molecular do cristal, indica que há no plano equatorial, uma água ligada covalentemente por um átomo de oxigênio, com o urânio, e há outra água (de cristalização) que está ligada por interações do tipo ligações de hidrogênio com a água de coordenação (ligação covalente). A hidratação (H₂O) dos sais é atribuída como água fracamente ligada (superficial), segundo IONASHIRO e col. (IONASHIRO *et al.*, 2005) e MÜLLER e col. (MÜLLER *et al.*, 2014). Estas duas moléculas (água de hidratação e de coordenação) são as primeiras a ser eliminadas. No segundo evento, nota-se uma perda de 24,503%, na qual está associada à eliminação dos acetatos, onde um deles se encontra bidentado ao urânio e o outro monodentado. Nesse evento ocorre consecutivamente a oxidação do urânio, formando o óxido de urânio U₃O₈, ficando como resíduo final da

decomposição, atingindo uma temperatura de 400°C, conforme ilustrado na Tabela 1. Na Figura 3, está mostrado uma associação da modelagem com as temperaturas de quebra de ligação na molécula estudada, relativas a termodecomposição dos grupos. De acordo com CLOUGH e col. (CLOUGH, *et al.*, 1969), observa-se que a diferencial térmica do acetato de urânio em atmosfera de ar, possui no primeiro evento, um pico endotérmico na referida variação de temperatura. Já no segundo pico, percebe-se uma decomposição exotérmica que ocorre de forma rápida, ocorrendo o que se chama pirólise dos acetatos. A Figura 3 ilustra a correlação entre a análise térmica e a modelagem molecular, indicando as faixas de temperaturas e as quebras de ligações com o urânio para a água e os acetatos coordenados.

CONCLUSÕES

Observou-se com o resultado da análise térmica, através das perdas da massa em função da variação de temperatura, que a estabilidade térmica do sal hidratado ocorre até uma temperatura de 84 °C, de acordo com a Tabela 1. Essa técnica nos faz inferir que há perda das duas águas no primeiro evento mostrado na Figura 1. Analisando juntamente com a estrutura do mono cristal, percebemos que a água de coordenação, esta ligada quimicamente, e a água de cristalização, esta realizando uma interação tipo, ligação de hidrogênio em forma de ponte com outra estrutura de célula unitária, sendo uma interação comumente considerada mais fraca, que a água de coordenação. Já no segundo evento há perdas de massa referente aos acetatos, um ligado monodentado e o outro formando um quelato ligado bidentado conforme estudado na literatura. A modelagem molecular mostra que, através das distâncias de ligações, é possível evidenciar os eventos das análises térmicas e inferir o que está sendo decomposto em cada etapa da curva termogravimétrica. Percebemos geralmente que, quanto maior a distância de ligação menor será a energia para rompê-la, e portanto, menor temperatura. Analogamente, podemos dizer que quanto menor a distância de ligação, maior energia para decompor a espécie molecular, conforme nas Figuras 1-3. Obviamente, as ligações com os átomos de natureza diferentes, adjacentes ao

oxigênio neste sistema estudado, também interferem no teor energético e na termo-estabilidade das ligações, não sendo portanto unicamente função das distâncias.

AGRADECIMENTOS

(Agradecemos ao PIBIC (IC) / PPPg / UFRN / CNPq, pelo apoio financeiro a COSTA, L. H. M., (bolsista PIBIT) e aos incentivos à pesquisa em química fundamental e aplicada.

REFERÊNCIAS:

1. AZÁROFF, L. V. "Elements of X-Ray Crystallography". McGraw-Hill Book Company, Inc. **1968**
2. BLEICHER L, SASAKI, J. M., - Introdução à difração de raios-x em cristais, *Apostila, Universidade Federal do Ceará*, **2000**.
3. CLOUGH, P. S.; DOLLIMORE, D. and GRUNDY, P. - The thermal decomposition of uranyl acetate, *J. inorg. nucl. Chem.*, **1969**, 31, 361-370
4. COELHO L. W., JUNQUEIRA, G. M. A., HERRERA, J. O. M. E MACHADO, S. DE P. - Aplicação de mecânica molecular em química inorgânica, *Química Nova*, **1999**, 22(3).
5. CULLITY, B. D. - "Elements of X-Ray Diffraction". Addison-Wesley Publishing Company, Inc. **1956**
6. DENARI, G. B., CAVALHEIRO, E. T. G., Princípios e Aplicação de Análise Térmico, *Apostila, Universidade de São Paulo, São Carlo*, **2012**.
7. FREITAS, L.C.G. - Prêmio Nobel de química 1999, *Química Nova na Escola*, **1998**, n. 8, p.3-6,.
8. HOWATSON, J. and GREV, D. M. - Crystal and Molecular Structure of Uranyl Acetate Dihydrate*, *J. inorg. Nact Chem.*, **1975**, 37, 1933-1935.
9. IONASHIRO, M. GIOLITO, I. - Fundamentos da Termogravimétrica e Análise Térmica Diferencial/ Calorimetria Exploratória Diferencial, São Paulo: Giz Editora, **2005**.
10. LIMA, Francisco José Santos; COSTA, L. H. M.; SILVA, A. O. - Estudos espectroquímico do Íon UO_2^{2+} coordenado no Acetato de uranila $\text{UO}_2(\text{H}_3\text{CCOO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, *Periódico Tche Química*, **2014**, vol. 11(22).
11. MARTINS, R. A. - A Descoberta dos Raios X: O primeiro comunicado de Röntgen. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, **1998**, 20, 373-39.
12. MATOS, J. R.; VICENTINI, G. e ZINNER, L. B., - Decomposição Térmica de Picratos Hidratados de Lantanídeos – *Resumos do XXX Congresso Brasileiro de Química*, **1990**, Vol 1, 21.
13. MÜLLER, M., VILLALBA, J. C. E ANAIS-SI, F. J. - Decomposição térmica (TG-DTA) de sais de ferro $[\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}]$ e $[\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}]$ com análise morfológica e química do produto final, *Semina: Ciências Exatas e Tecnológicas*, Londrina, **2014**, v. 35, n. 1, p. 9-14, jan./jun.
14. NAKAGAWA, K.; AMITA, K.; MIZUNO, H.; INOUE, Y. And HAKUSHI, T., - Preparation Of Some Lanthanoid Picrates and The Behaviour Of Their Water Of Hydration – *Bull. Chym. Soc. Jpn.*, **1987**, 60, 2037-40.
15. RODRIGUES, C. R. Modelagem Molecular. *Química Nova na Escola, Edição Especial, fevereiro de 2001*.
16. ROSSO, N. D., LIMA, R. C. A., CARUBELI, C. R. e SCHNITZE, E. - Estudos de equilíbrio, espectroscópicos e térmicos para caracterização do complexo formado entre o aspartame e o íon $\text{Cu}(\text{II})$, *Revista Varia Scienti*, **2005**, V. 05, n. 10, p. 123-136
17. SANTOS, H. F. – O conceito da Modelagem Molecular, *Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola*, **2001**, N° 4 – Maio.
18. SILVA, S. S., MAGALHÃES, F., SANSIVIERO, M. T. C., - Nanocompósitos semicondutores ZnO/TiO_2 . Testes fotocatalíticos, *Quím. Nova*, **2010**, vol.33 n° 1 São Paulo.
19. TORRIANI I. L. - Cristalografia: uma ciência multidisciplinar, *Ciência e Cultura*, São Paulo, Sept. **2014**, vol.66 n° 3.
20. WARREN, B. E. "X-Ray Diffraction". Dover Publications, Inc. (1969)

Tabela 01 – Eventos térmicos experimentais

Eventos	Intervalo de Temperatura (°C)	Pico de Temperatura (°C)	% de Perda de Massa	Perda de Massa Molar (g/mol)	Espécie Molecular Atribuída (Quantidade)
1	84 - 163	121	7,982	33,856	2 H ₂ O
2	200 - 395	345	24,503	103,93	2 CH ₃ COO ⁻
resíduo	400	-	67,515	280	U ₃ O ₈

Figura 1. – Análise térmica do acetato de uranila di-hidratado em atmosfera dinâmica de ar

Figura 2. – Modelagem molecular do acetato de uranila dihidratado. Distância de ligação em vermelho. Átomos: carbono (cinza), oxigênio (vermelho), hidrogênio (branco), urânio (azul).

Figura 3. – Associação da quebra de ligações em função da temperatura na termo-decomposição, com a modelagem molecular do acetato de uranila dihidratado. Distância de ligação em vermelho. Átomos: carbono (cinza), oxigênio (vermelho), hidrogênio (branco), urânio (azul).