

Modelagem matemática fenomenológica da adsorção do corante reativo azul 5G utilizando *Leucaena Leucocephala* (LAM)

Phenomenological mathematical modelling of 5G blue reactive dye adsorption using *Leucaena Leucocephala* (LAM)

RESUMO

O processo de adsorção vem sendo empregado com sucesso no tratamento de efluentes contendo corantes têxteis, permitindo a remoção deste tipo de poluente recalcitrante até o limite estabelecido pelas legislações vigentes, apresentando como destaque a facilidade de operação e relativo baixo custo. Materiais de origem biológica, encontrados de forma abundante na natureza vêm sendo testados como possíveis materiais adsorventes. Desta forma, as folhas da leucena, árvore exótica encontrada em quase todo o país, foram testadas como biossorbente para o corante reativo Azul 5G. Modelagem matemática fenomenológica foi aplicada para identificação da etapa limitante de transferência de massa, permitindo assim, a compreensão do fenômeno adsorptivo. As etapas de transferência de massa externa, interna e a adsorção nos sítios ativos foram consideradas como possíveis mecanismos controladores do processo. De acordo com as curvas cinéticas avaliadas, a etapa de adsorção nos sítios ativos é a mais lenta do processo e assim, deve ser observada no projeto deste processo em escala industrial.

PALAVRAS-CHAVE: Adsorção, modelagem matemática, corante.

ABSTRACT

The adsorption process has been successfully employed in the treatment of effluents containing textile dyes, allowing the removal of this type of recalcitrant pollutant to the limit established by current legislation, highlighting the ease of operation and relative low cost. Materials of biological origin, found abundantly in nature have been tested as possible adsorbing materials. In this way, the leaves of the leucena, an exotic tree found almost all over the country, were tested as biosorbent for the 5G Blue reactive dye. Phenomenological mathematical modeling was applied to identify the limiting step of mass transfer, thus allowing the understanding of the adsorptive phenomenon. The stages of external and internal mass transfer and adsorption at the active sites were considered as possible controlling mechanisms of the process. According to the evaluated kinetic curves, the adsorption step in the active sites is the slowest of the process and thus should be observed in the design of this process on an industrial scale..

KEYWORDS: Adsorption, mathematical modeling, dye.

Marina Raquel Bento de Camargo
marina.camargo1@outlook.com
Universidade tecnológica federal do Paraná, Dois Vizinhos, Paraná, Brasildu.br

Heloíse Angélica Giacobbo
heloisegiacobbo@alunos.utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Dois Vizinhos, Paraná, Brasil

Matheus José Perin
matheusjoseperin@hotmail.com
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Dois Vizinhos, Paraná, Brasil

Pedro Yahico Ramos Suzuki
pedrosuzaki@utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Dois Vizinhos, Paraná, Brasil

Gracielle Johann
graciellej@utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Dois Vizinhos, Paraná, Brasil

Recebido: 19 ago. 2019.

Aprovado: 01 out. 2019.

Direito autorial: Este trabalho está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição 4.0 Internacional.



INTRODUÇÃO

O processo de adsorção tem sido aplicado de maneira eficaz na remoção de corantes têxteis, como o Azul 5G, apresentando como vantagens o baixo custo e simplicidade de operação (Monte Blanco et al. 2017). Para viabilidade econômica deste tipo de processo, tem-se buscado materiais que além do baixo custo, sejam capazes de remover os poluentes até os níveis exigidos por lei (Farooq et al. 2010). Para aplicação industrial do processo de adsorção, é de fundamental importância o conhecimento do mecanismo limitante de transferência de massa entre a substância a ser adsorvida e o material adsorvente (Monte Blanco et al. 2017). Esta informação pode ser obtida por meio de modelagem matemática fenomenológica, que permite a compreensão deste tipo de processo de remoção (Suzaki et al. 2017).

A *Leucaena leucocephala* (LAM), também conhecida como leucena, é uma espécie e planta invasora originária da América Central que se encontra espalhada por todo o Brasil devido a facilidade de adaptação com o clima e solo do país (Vasconcelos et al. 2006). Assim, este trabalho teve como objetivo, avaliar a aplicação da folha da leucena na remoção do corante reativo Azul 5G, buscando identificar por meio de modelagem matemática o mecanismo de transferência de massa que controla o processo.

MATERIAIS E MÉTODOS

As folhas de leucena utilizadas como material biossorvente foram coletadas no município de Dois Vizinhos (Paraná) e secas em estufa a 40°C por 24 h. Após este tempo, as folhas foram moídas em moinho de facas e armazenadas em dessecador para posterior uso como material adsorvente. Por análises prévias não houve a necessidade de realizar granulometria.

Soluções sintéticas do corante reativo Azul 5G foram preparadas com água destilada em balões volumétricos nas concentrações de 40 mg L⁻¹ e 200 mg L⁻¹. Os ensaios cinéticos de adsorção para cada uma das concentrações iniciais de corante avaliadas (40 mg L⁻¹ e 200 mg L⁻¹) foram realizados em béquer com 400 mL de solução de corante em contato com 0,4 g de material biossorvente. Em intervalos de tempo pré-determinados, alíquotas da solução foram coletadas do sistema e as respectivas absorbâncias foram determinadas em espectrofotômetro UV-Vis no comprimento de onda de 623 nm. Por meio de uma curva de calibração linear, os valores de absorbâncias foram convertidos para concentração em mg L⁻¹.

Modelos matemáticos fenomenológicos foram então ajustados aos dados experimentais para identificação da possível etapa limitante de transferência de massa. As seguintes etapas foram investigadas como possíveis mecanismos do processo adsorvente: resistência a transferência de massa externa (Eq 1), resistência a transferência de massa externa (Eq 2) e adsorção na superfície (Eq 3).

$$\frac{dq}{dt} = K_f \cdot (C - C^*) \quad (1)$$

$$\frac{dq}{dt} = -K_s \cdot (q - q^*) \quad (2)$$

$$\frac{dq}{dt} = K_a \cdot (q_{max} - q) \cdot C - \frac{K_a}{b} \cdot q \quad (3)$$

Em todos os modelos considerou-se o equilíbrio representado pela isoterma de Langmuir (1918). K_f é a constante referência a resistência a transferência de massa filme fluido. K_s é a constante referência a difusão do adsorvato no interior da partícula adsorvente. K_a é a constante referente ao processo de adsorção.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

As Figuras 1 e 2 mostram o comportamento cinético experimental e teórico da adsorção do corante 5G utilizando folhas de leucena como material biossorvente com concentrações diferentes, sendo estas 40mg L^{-1} e 200mg L^{-1} .

Figura 1 - Cinética experimental e modelada da remoção do corante reativo Azul 5G na concentração inicial de 40mg L^{-1} utilizando folhas de leucena como material biossorvente.

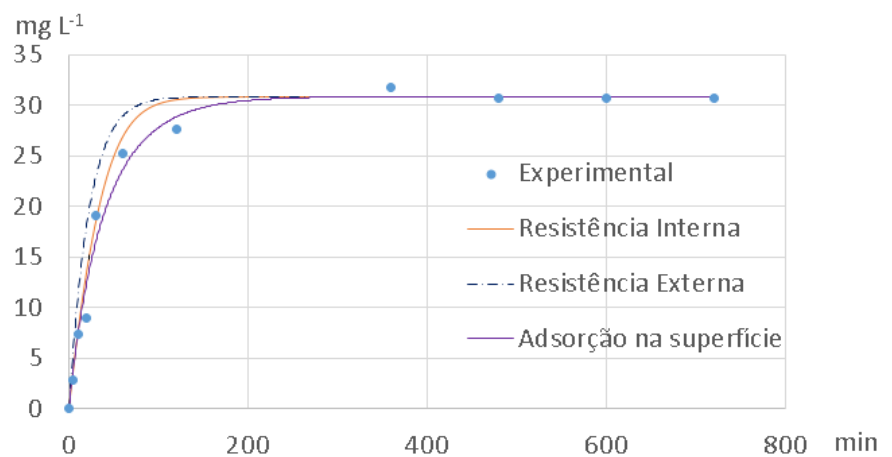
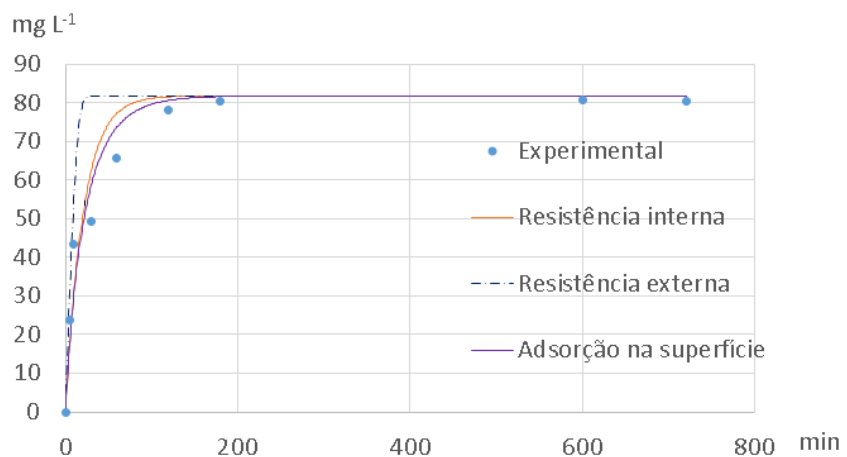


Figura 2 - Cinética experimental e modelada da remoção do corante reativo Azul 5G na concentração inicial de 200mg L^{-1} utilizando folhas de leucena como material biossorvente.



Pode-se observar em ambas as curvas que no início do processo, a remoção ocorre de forma acentuada, e a medida que o processo se aproxima do equilíbrio a velocidade de remoção diminui. A maior velocidade no início do processo pode ser atribuída ao maior gradiente de concentração, a medida que esse gradiente diminui, a velocidade torna-se menor, até o ponto em que o processo atinge o equilíbrio e a remoção cessa.

Para avaliação do modelo que melhor representa o comportamento cinético para as concentrações de 40 e 200 mg L⁻¹ o coeficiente R² foi considerado.

Tabela 1 – Parâmetros dos modelos ajustados as curvas cinéticas de remoção do corante reativo Azul 5G utilizando folhas de leucena como material bioissorvente.

Parâmetros	Concentração inicial (mgL ⁻¹)	
	40	200
K _f (L g ⁻¹ min ⁻¹)	0,0352	0,0352
R ²	0,902	0,778
K _s (min ⁻¹)	0.0125	0.0453
R ²	0,976	0,924
K _a (L mg ⁻¹ min ⁻¹)	0.0002	0.0002
R ²	0,983	0,946

De acordo com coeficiente R², assim como o observado nas Figuras 1 e 2, o modelo que considera a adsorção nos sítios ativos como etapa mais lenta do processo foi o que melhor representou o comportamento cinético de adsorção do corante pelas folhas de leucena. Assim, pode-se inferir que este fenômeno é o que controla a transferência de massa do corante da fase líquida para a sólida.

CONCLUSÕES

De acordo com a modelagem matemática fenomenológica aplicada para representar a cinética de adsorção do corante reativo Azul 5G utilizando folhas de leucena como material bioissorvente, a adsorção nos sítios ativos do adsorvente é a etapa que controla a transferência de massa da remoção do corante, sendo utilizada a interpretação dos resultados o indicador R² de que o fenômeno teve mais influência. Assim, o modelo constitui-se em uma importante ferramenta para compreensão e elaboração de projetos envolvendo o processo estudado.

REFERÊNCIAS

BLANCO, S. P. D. M.; SCHEUFELE, F. B.; MÓDENES, A. N.; et al. Kinetic, equilibrium and thermodynamic phenomenological modeling of reactive dye adsorption onto polymeric adsorbent. *Chemical Engineering Journal*, v. 307, p. 466–475, 2017.

FAROOQ, U.; KOZINSKI, J. A.; KHAN, M. A.; ATHAR, M. Biosorption of heavy metal ions using wheat based biosorbents--a review of the recent literature. *Bioresource technology*, v. 101, n. 14, p. 5043–53, 2010.

LANGMUIR, I. THE ADSORPTION OF GASES ON PLANE SURFACES OF GLASS, MICA AND PLATINUM. *Journal of the American Chemical Society*, v. 40, n. 9, p. 1361–1403, 1918.

SUZAKI, P. Y. R.; MUNARO, M. T.; TRIQUES, C. C.; et al. Biosorption of binary heavy metal systems: Phenomenological mathematical modeling. *Chemical Engineering Journal*, 2017.

VASCONCELOS, G. J. N.; JÚNIOR, M. G. C. G.; BARROS, R. Extratos aquosos de *Leucaena leucocephala* e *Sterculia foetida* no controle de *Bemisia tabaci* biótipo B (Hemiptera: Aleyrodidae). *Ciência Rural*, v. 36, n. 5, p. 1353-1359, 2006