



ESTUDO DA CINÉTICA DE ADSORÇÃO DE CARVÃO ATIVADO FUNCIONALIZADO COM ÓXIDO DE GRAFENO NA REMOÇÃO DE DIURON DE ÁGUA CONTAMINADA

*Jumara Silva de Sousa*¹, *Nicolle Ramos dos Santos*², *Maria Eliana Camargo Ferreira*³,
*Jayana Freitas Resende*⁴, *Rosângela Bergamasco*⁵, *Angélica Marquetotti Salcedo*
*Vieira*⁶

¹Doutoranda do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química - PEQ/UEM, Campus Maringá-PR, Universidade Estadual de Maringá - UEM. Bolsista Capes. pg55425@uem.br

²Doutoranda do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química - PEQ/UEM, Campus Maringá-PR, Universidade Estadual de Maringá - UEM. pg56103@uem.br

³Doutora pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química - PEQ/UEM, Campus Maringá-PR, Universidade Estadual de Maringá - UEM. camargo_ferreira@hotmail.com

⁴Doutoranda do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química - PEQ/UEM, Campus Maringá-PR, Universidade Estadual de Maringá - UEM. pg55151@uem.br

⁵Doutora, Departamento de Engenharia Química, Campus Maringá-PR, Estadual de Maringá - UEM. Pesquisadora do Programa de Pós-graduação em Engenharia Química – PEQ. rbergamasco@uem.br

⁶Orientadora, Doutora, Departamento de Engenharia de Alimentos, UEM. Pesquisadora do Programa de Pós-graduação em Engenharia Química – PEQ. amsvieira@uem.br

RESUMO

A presença de contaminantes emergentes no ambiente aquático tornou-se um dos desafios da atualidade, principalmente diante do uso indiscriminado de herbicidas e pesticidas, como o Diuron, o qual pode gerar desequilíbrios nos sistemas aquáticos e riscos à saúde pública. Diante deste cenário, a busca por tratamentos alternativos tornou-se essencial. A adsorção é uma técnica não convencional capaz de remover poluentes. Neste estudo utilizou-se carvão ativado funcionalizado com óxido de grafeno para remoção de diuron da água. Os resultados encontrados demonstram uma capacidade adsorptiva de $11,6 \pm 0,17 \text{ mg g}^{-1}$ e porcentagem de remoção de 96 % em 480 min de ensaio, indicando que o material em estudo demonstra alto potencial de adsorção de diuron.

PALAVRAS-CHAVE: compósito; herbicida; tratamento de água.

1 INTRODUÇÃO

A contaminação por poluentes emergentes representa uma preocupação ambiental, uma vez que traz consequências relevantes para saúde pública e para o ecossistema (QUIMBAYO et al., 2024). Entre esses poluentes, o diuron destaca-se visto que é um herbicida amplamente utilizado e conhecido por seus efeitos adversos em organismos aquáticos em razão de sua baixa solubilidade, longa persistência e estabilidade química, o que resulta em riscos a longo prazo (HAO et al., 2022).

Tal realidade afeta a vida aquática e a dos seres humanos, o que requer tratamentos capazes de remover o diuron da água, como os tratamentos não convencionais. A adsorção é uma das técnicas que vem se destacando por ser um método de baixo custo, alta eficiência e remoção de contaminantes emergentes.

Diversos materiais podem ser utilizados como adsorventes, dos quais o carvão ativado é um dos mais utilizados para remoção de poluentes da água devido a sua eficiência e viabilidade econômica (YOSSA et al., 2020). O carvão ativado (CA) é um material poroso e amorfo, sendo amplamente utilizado em processos de adsorção. Sua alta área superficial e porosidade o tornam ideal para diversas aplicações. Ele pode ser produzido a partir de uma variedade de resíduos, o que o torna uma opção sustentável



para o reuso de materiais. Além disso, o CA pode ser combinado com outros materiais para criar adsorventes híbridos com propriedades aprimoradas (BRITO et al., 2023).

Outro material é o óxido de grafeno (OG), trata-se de um material bidimensional, semelhante a uma folha, obtido pela oxidação do grafeno. A sua estrutura é caracterizada pela presença de grupos funcionais que contêm oxigênio. Nas bordas, encontram-se grupos carboxila e carbonila, enquanto na superfície da folha (plano basal) estão os grupos epóxi e hidroxila (KAHRAMAN; SAYGILI, 2024).

Diante da problemática do diuron no ambiente aquático, o objetivo deste estudo foi avaliar a cinética de adsorção do CA funcionalizado com OG no processo de adsorção para remoção do diuron de água contaminada.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

Os experimentos foram realizados no Departamento de Engenharia Química no Laboratório de Gestão, Controle e Preservação Ambiental (LGCPA) da Universidade Estadual de Maringá.

Para sintetizar o óxido de grafeno (GO) foram utilizado o pó de grafite (Sigma Aldrich), persulfato de sódio ($K_2S_2O_8$, Sigma Aldrich, 99,5 %), permanganato de potássio ($KMnO_4$, Sigma Aldrich, 99,0 %), ácido sulfúrico (H_2SO_4 , 98 %), ácido clorídrico (HCl, Merck, 37 %) e peróxido de hidrogênio (H_2O_2 , Sigma Aldrich, 30 % em peso em H_2O). a Síntese foi realizada seguindo o método de Hummer's modificado, conforme metodologia proposta por Kovtyukhova et al. (1999).

A funcionalização do carvão com óxido de grafeno (CA-OG) foi realizado pelo método de impregnação úmida e conduzido de acordo com a metodologia realizada por Brito et al. (2023), com adaptações.

2.1 Ensaios de adsorção

Para avaliar a capacidade de remoção do CA-OG foram realizados de adsorção utilizando uma massa de 10 mg de material e 20 mL de água contaminada com diuron na concentração de 24 mg L^{-1} , a qual foi confirmada através de espectrofotômetro UV-vis (Hach, DR 6000) em 210 nm. Os ensaios foram conduzidos em batelada em shaker com agitação orbital (Tecnal TE-424) por um tempo de 5 a 480 minutos sob agitação de 150 rpm e temperatura de $25 \text{ }^\circ\text{C}$.

Aos dados experimentais foram ajustados os modelos de pseudo-primeira ordem (PPO), pseudo-segunda ordem (PSO) e Elovich (Equações 1, 2 e 3, respectivamente).

$$q_{ads} = q_e [1 - e^{-k_1 t}] \quad (1)$$

$$q_{ads} = \frac{k_2 q_e^2 t}{1 + k_2 q_e t} \quad (2)$$

$$q_{ads} = \frac{1}{\beta} \ln(\alpha\beta) + \frac{1}{\beta} \ln t \quad (3)$$

Onde q_e e q_{ads} (mg g^{-1}) e são as capacidades de adsorção no equilíbrio e no tempo t (min), respectivamente; k_1 (min^{-1}) e k_2 ($\text{mg g}^{-1} \text{ min}^{-1}$) são as constantes dos modelos de pseudo-primeira ordem e pseudo-segunda ordem; α é a taxa de adsorção inicial ($\text{mg g}^{-1} \text{ min}^{-1}$) e β é a constante de dessorção (mg g^{-1}).



A capacidade de adsorção (q_{ads}) e a porcentagem de remoção por calculadas através das Equações 4 e 5, nesta ordem:

$$q_{ads} = \frac{(C_i - C_f)V}{m} \quad (4)$$

$$\% \text{ Remoção} = \frac{(C_i - C_f)}{C_i} \times 100 \quad (5)$$

Onde, C_i é a concentração inicial e C_f a concentração final da solução (mg L^{-1}), m é a massa (g) do adsorvente e V o volume da solução (L).

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

O estudo cinético demonstrou uma capacidade de adsorção (q_{ads}) de $11,6 \pm 0,17 \text{ mg g}^{-1}$ em 480 minutos, cuja porcentagem de remoção foi de 96 %. Além disso, observou-se que a q_{ads} aumentou rapidamente nos minutos iniciais, porém uma diminuição da taxa de adsorção após 30 minutos de ensaio foi evidenciada, conforme demonstrado na **Figura 1**.

Em relação aos modelos matemáticos empregados, o modelo de Elovich foi o que se ajustou melhor aos dados experimentais, com um coeficiente de determinação (R^2) de 0,99 (Tabela 1). Segundo Quesada et al. (2022), o modelo de Elovich é aplicado a superfícies heterogêneas e atribui a possibilidade de ocorrência de adsorção química, sugerindo que o mecanismo predominante de adsorção do CA-OG ocorreu por meio de quimissorção.

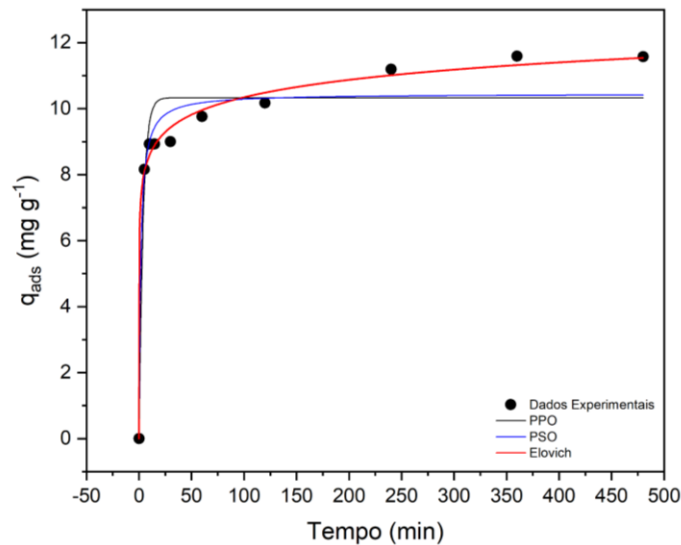


Figura 1: Cinética de adsorção do diuron
 Fonte: Dados da pesquisa

Tabela 1: Parâmetros cinéticos para a adsorção de diuron em CA-OG.

Modelo	Parâmetros	
PPO	$q_{ads} \text{ (mg g}^{-1}\text{)}$	$10,33 \pm 0,40$
	$K_1 \text{ (min}^{-1}\text{)}$	$0,26 \pm 0,07$



	R^2	0,92
	χ^2	1,03
PSO	qads (mg g ⁻¹)	10,45 ± 0,07
	K ₂ (min ⁻¹)	0,06 ± 0,001
	R^2	0,92
	χ^2	0,04
Elovich	α (mg g ⁻¹ min ⁻¹)	6065,31 ± 5439,36
	β (mg g ⁻¹)	1,31 ± 0,01
	R^2	0,99
	χ^2	0,07

Fonte: Dados da pesquisa

Diante disso, a análise da interação entre o herbicida Diuron e o compósito adsorvente carvão ativado-óxido de grafeno (CA+GO) revelou uma afinidade notável em apenas 480 minutos. Esse desempenho sugere uma forte interação entre o contaminante e a superfície funcionalizada do adsorvente e evidencia a potencial capacidade desse material na remoção de contaminantes emergentes. Entretanto, são necessários mais estudos para aprofundar o entendimento do processo adsorptivo desse compósito.

4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O presente estudo teve como objetivo avaliar a capacidade adsorptiva do carvão ativado funcionalizado com óxido de grafeno para remoção de diuron. A pesquisa evidenciou que a funcionalização do carvão ativado com óxido de grafeno utilizando o método de impregnação úmida, resultou em um material compósito com uma capacidade adsorptiva aprimorada, atingindo um valor de 11,6 mg g⁻¹ e uma capacidade de remoção de 96 %, tendo como Elovich o modelo que melhor ajustou-se aos dados experimentais, indicando que uma possível adsorção química como mecanismo predominante.

Esses resultados demonstram que a incorporação do OG pode atuar sinergicamente, melhorando as propriedades adsorptivas do carvão ativado, tornando-o uma potencial alternativa na remoção de herbicidas e de outros contaminantes emergentes. Entretanto, análises mais aprofundadas são necessárias para melhor compreensão da atuação do CA-OG como adsorvente.

REFERÊNCIAS



BRITO, Carlos Henrique Vieira et al. Porous activated carbon/graphene oxide composite for efficient adsorption of pharmaceutical contaminants. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 191, p. 387-400, 2023.

HAO, Beibei et al. Individual and combined toxicity of microplastics and diuron differs between freshwater and marine diatoms. **Science of the Total Environment**, v. 853, p. 158334, 2022.

KAHRAMAN, Ebru; NASUN-SAYGILI, Gulhayat. 5-Fluorouracil adsorption on graphene oxide-amine modified graphene oxide/hydroxyapatite composite for drug delivery applications: Optimization and release kinetics studies. **Heliyon**, v. 10, n. 19, 2024.

KOVTYUKHOVA, Nina I. et al. Layer-by-layer assembly of ultrathin composite films from micron-sized graphite oxide sheets and polycations. **Chemistry of materials**, v. 11, n. 3, p. 771-778, 1999.

QUESADA, Heloise Beatriz et al. Caffeine removal by chitosan/activated carbon composite beads: Adsorption in tap water and synthetic hospital wastewater. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 184, p. 1-12, 2022.

QUIMBAYO, Jennyffer Stefania Martinez et al. Photocatalytic degradation of Diuron in water—Impact of Rh impregnation on P25 visible light activity. **Journal of Water Process Engineering**, v. 68, p. 106323, 2024.

YOSSA, LM Ndjientcheu et al. Synthesis of a cleaner potassium hydroxide-activated carbon from baobab seeds hulls and investigation of adsorption mechanisms for diuron: Chemical activation as alternative route for preparation of activated carbon from baobab seeds hulls and adsorption of diuron. **Scientific African**, v. 9, p. e00476, 2020.