

Uso de Ferramentas Quimiométricas para Otimização da Capacidade Adsorptiva de Carvões Ativados

Emerson F. Jaguaribe¹(PQ), Luciana de L. Medeiros²(PQ)^{*}, Karina K. P. Porpino¹(IC), Sueny K. B. Freitas³(PG), Wallace D. Fragoso³(PQ), Maryelzy F. D. Oliveira¹(IC).

1-Laboratório de Carvão Ativado, Universidade Federal da Paraíba, Centro de Tecnologia, Campus I

2-Bolsista CNPq, Laboratório de Carvão Ativado, Universidade Federal da Paraíba, Centro de Tecnologia, Campus I, e-mail: luciana_lmedeiros@yahoo.com.br

3-Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba.

Palavras Chave: Carvão Ativado, Quimiometria.

Introdução

Carvões ativados são excelentes adsorventes, cuja matéria prima mais utilizada para sua produção é o endocarpo de coco da baía. O processo de ativação pode ser por via química (HCl, H₃PO₄, ZnCl₂, KOH e etc.) ou via física (CO₂ e vapor de água). As principais variáveis do processo de produção de carvões ativados quimicamente^[1], são: a concentração do reagente ativante (**C**), temperatura máxima de carbonização (**T**), razão de aquecimento (**R**) e tempo de residência na temperatura final de carbonização (**t**).

Objetivando identificar quais destas variáveis influenciam diretamente na capacidade adsorptiva, de carvões produzidos com endocarpo de coco da baía ativado com H₃PO₄, e conseqüentemente otimizar um programa de pirólise para o mesmo, neste trabalho foi realizado um planejamento fatorial 2⁴ completo em duplicata^[2] totalizando trinta e dois experimentos. Os carvões foram produzidos em um forno elétrico rotativo. Os níveis das variáveis selecionadas foram 90 e 120% para a **C**, 400 e 450 °C para **T**, 5 e 10°C/min para **R** e 0:30 e 2:00 horas para o **t**.

As respostas estudadas, que são parâmetros utilizados na caracterização do poder adsorptivo de carvões ativados, foram: Densidade aparente (**D**), área superficial calculada pelo método de BET, (**BET**) e volume de microporos dos carvões ativados resultantes (**VM**), (determinados em um ASA 2010 da macromeritic).

Resultados e Discussão

A **Tab. 1** apresenta a estimativa dos efeitos principais e de interação das variáveis estudadas para as respostas **D**, **BET** e **VM**. São considerados significativos, os efeitos cujos valores absolutos sejam superiores ao desvio padrão dos efeitos, para cada resposta (S_{efeito}). Observa-se que: para a resposta **D** apenas o **t** não foi significativo; enquanto que para **BET**, os fatores que não são significativos foram **C** e **T**. Contrariando este comportamento, o **VM**, teve todos os seus efeitos principais estatisticamente significativos.

30ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Tabela 1. Estimativa dos efeitos principais e de interação para as respostas **D**, **BET** e **VM**.

Efeitos	D (gcm ⁻³)	BET (m ² g ⁻¹)	VM (cm ³ g ⁻¹)
Média dos efeitos	0,3996	1154,78	0,4356
Efeitos principais			
C - %	-0,011875	-	-0,025
T - °C	-0,014375	-	-0,0275
R - °C/min	0,023125	-88,1875	-0,03625
t - h	-	115,687	0,03625
Efeitos de interação			
TR	-0,015625	-	-
Tt	-0,011875	49,6875	-
CR	-	45,1875	-
Ct	-	-	0,02
$T_{(16,95\%)} \times S_{efeito}$	0,011777	37,681	0,017276

Os efeitos de duas interações foram considerados significativos para as três respostas estudadas. Para a **D** os fatores **TR** e **Tt** foram significativos, já para a resposta **BET**, apresentaram significância **CR** e **Tt** e para o **VM** os efeitos de interação estatisticamente significativos foram **Ct**.

Conclusões

De acordo com os resultados estatísticos de significância dos efeitos, pode-se otimizar o programa de pirólise, para que se possa aumentar o valor das respostas estudadas. Para valores maiores de **D**, é necessário que use uma **T** de 400°C, **R** de 5°C/min e **t** igual a 2:00h. Já para área superficial **BET**, necessita-se de uma concentração de 120% do agente ativante e um programa de pirólise de 400/10/0:30. Valores mais elevados de **VM**, podem ser obtidos com **C** de 90% e um **t** de 0:30h.

Agradecimentos

CNPq/ CTPETRO

¹Almansa, C., Molina-Sabio, M.; Rodríguez-Reinoso, F., Microporous and Mesoporous Materials, **2004**. 76, 185 –191

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

² Barros Neto, B., Scarminio, I.S. and Bruns, R.E.; Como Fazer Experimentos, Pesquisa e Desenvolvimento na Ciência e na Indústria; Editora da UNICAMP, Campinas, SP, 2001.