# MODELAGEM CINÉTICA DA DEGRADAÇÃO FOTOCATALÍTICA DE ÁCIDO BENZOICO POR CATALISADOR HETEROGÊNEO

João Vitor Schuppel (1)
Matheus Devalieri (2)
Rodrigo Nardi (3)
Evandro Balestrin (4)

Resumo

A degradação de compostos orgânicos persistentes, como o ácido benzoico, representa um desafio ambiental significativo devido à sua estabilidade e baixa biodegradabilidade. Neste trabalho, avaliou-se a degradação fotocatalítica do ácido benzoico em meio aquoso, empregando dióxido de titânio ($TiO_2$) como catalisador heterogêneo sob radiação ultravioleta (UVC). As concentrações residuais foram determinadas por espectrofotometria UV-Vis (λ = 227 nm), utilizando uma curva de calibração construída previamente. A análise cinética baseou-se no modelo de Langmuir-Hinshelwood. Os resultados indicaram uma redução progressiva da absorbância ao longo do tempo, evidenciando a degradação do ácido benzoico. A linearidade observada na relação $\ln(C_0/C_t)$ versus tempo confirmou o comportamento de primeira ordem, permitindo a determinação da constante de velocidade k como sendo igual a 0,0037 $min^{-1}$.O processo fotocatalítico com $TiO_2$ sob radiação UVC é eficaz para a degradação do ácido benzoico, atingindo uma eficiência de remoção de 31,10% após os 105 minutos de reação,demonstrando potencial aplicação em tratamentos avançados de efluentes contendo compostos aromáticos.

Palavras-chave: cínetica heterogênea, dióxido de titânio, ácido benzoico, modelo de Langmuir-Hinshelwood.

## 1 INTRODUÇÃO

A poluição hídrica é um dos temas mais relavantes atualmente e diversos poluentes, considerados emergentes, estão sendo abordados nas técnicas de remediação e controle da poluição. Estes micropoluentes apresentam um potencial de toxicidade e contaminação ambiental por acumulação, conforme citado por Chiavenato (2017).

Dentre os processos envolvendo a fotocatálise heterogenêa, processo que envolve um sistema liquido-sólido para catálise sob a luz, vem ganhando espaço sob a degração de poluentes emergentes, pois é uma forma eficiente e versátil de controle da poluição pelo emprego de eletróns como meio reativos para a oxidação de poluentes (CERVANTES et al., 2009).

Ferreira e Daniel (2004) cita que o mecanismo da geração de hidroxilas (-OH) pelo óxidos metálicos, especialmente o $TiO_2$ baseia-se na irradiação luminosa por ondas especificas (em especial a UV do tipo C) garante a transição energética de estado do elétron para fóton, formando sítios oxidantes e redutores que catalisam reações quimicas.

Dentro do campo da química ambiental, diversos estudos relatados por Bacarro et al. (2019) utilizando sistemas fotocatáliticos heteregêneos com TiO2 para mensuração de contaminantes orgânicos em águas, em especial o ácido benzóico e em sistemas de medição de carbono orgânico volátil (COVs) e demanda química de oxígênio (DQOs), mostrando a pluralidade e versatilidade do emprego de $TiO_2$.

Desta forma, o objetivo deste estudo é explorar a cinética de degradação do ácido benzoíco em sistemas fotocatálitico catalisado heterogeneamente por $TiO_2$.

## 2 **DESENVOLVIMENTO**

### 2.1 - MATERIAIS E MÉTODOS

O experimento foi executado no laboratório da Unoesc de Videira, bloco K. Inciou-se com a realização da curva de calibração no espectofotômetro UV-vis para o ácido benzóico e a realização da degradação do composto em reator fotocatalítico por catalisador em sistema UV/$TiO_2$.

2.1.1 - Curva de Calibração do Ácido Benzoico

A curva de calibração foi realizada a partir de uma solução estoque de ácido benzóico com 100 mg/l de concentração, onde foram realizadas diluições para balões volumétricos de 250 ml para criar os pontos da curva, estabelecidos em 1 mg/l, 5 mg/l, 10 mg/l, 15 mg/l e 20 mg/l como mostrado na Fotografia 1.

A medição de absorbância foi realizada em espectofotômetro UV-Vis sob comprimento de onda de 227 nm em cubeta de quartzo com caminho ótico de 10 mm. Para o branco, estabeleceu-se agua destilada.

Através da correlação entre a concentração (eixo y) e absorbância (eixo x) foi possivel obter a equação da reta dos dados.

2.1.2 - Montagem do Reator Fotocatálitico e Sistema Reacional

O reator fotocatalítico foi construído partindo de uma caixa de madeira, acoplada a um sistema de fonte de luz ultravioleta do tipo C (comprimento de onda de 254 nm) acoplado um sistema de agitação por barra magnética e como corpo do reator um béquer de vidro com capacidade 500 ml conforme Fotografia 2. Este sistema foi modelado como um reator batelada.

Para montagem do sistema reacional, 0,015 g de catalisador heterogêneo díoxido de titânio - $TiO_2$ - (popurlamente conhecido como Aerosil) foi adicionado em uma solução de concentração conhecida de ácido benzóico estimada em 15 mg/l, equivalente a 150 ml.

Uma aliquota desta mistura reacional foi mensurada a absorbância no espectofotômetro UV-Vis (Fotografia 3) sob comprimento de onda de 227 nm para determinar a concentração inicial do sistema (Ca0) por intermédio da equação da reta da curva de calibração.

2.1.3 - Determinação da Cinética da Reação de Degradação sob Fotocatálise Heterogênea

De modo a construir a cinética de degradação, em tempos pré determinados foram retiradas alíquotas de 3 ml e filtradas em sistemas de filtro HPLC 0,25 micrômetros, para remover o catalisador e medir a absorbância.

Utilizando o método integral e admitindo que a reação de fotocatálise heterogênea do ácido benzoico pelo metodo de Langmuir-Hinshelwood como uma cinética de pseudo-primeira ordem, devido a baixa concentração de ácido benzoico, foi realizado a simplificação da equação e a plotagem do gráfico utilizando o logaritmo natural da relação entre a concentração inicial no eixo y pela concentração do tempo no eixo x.

Os dados de absorbância foram transformados em concentração em mg/L, estimando a eficiencia de degradação do ácido benzoico, bem como a determinação da constante cinética k, que determina a proporcionalidade da velocidade da reação de degradação.

2.2 RESULTADOS E DISCUSSÃO

2.2.1 - Curva de Calibração para Ácido Benzóico

A curva de calibração obtida apresentou um valor de R2 calculado em 0,9999, conforme apresentado no Gráfico 1. A curva de calibração apresentou uma excelente correlação estatística entre os dados.

A concentração inicial da solução de acido benzóico foi determinada em 14,32 mg/l, apresentando um desvio padrão de 4,53%.

2.2.2 - Cinética Química para Reação Fotocatalítica Heterogênea do Ácido Benzoico

A cinética da reação é apresentada no Gráfico 2, onde obteve-se o perfil da velocidade cinética da reação com um R2 em 0,9677. Os valores da equação da reta foi definida como y=0,0037x+0,0026.

Como o sistema reacional é de pseudo-primeira ordem (Langmuir-Hinschelwood), foi correlacionado o termo ax (coeficiente angular) com a definição da constante de velocidade aparente (k) para esta reação fotocatalítica de 0,0037 $min^{-1}$.

A degradação fotocatalítica do ácido benzoico por este sistema de catálise heterogêneo foi máxima em 105 minutos com 31,10% de remoção. Este valor difere com os Spazzini (2018) onde foi possivel obter uma cinética de degração de quase 50% próximo aos 60 minutos de reação que pode estar atrelada a concentração de ácido empregada, que foi inferior ao deste

estudo devido as condições empregada diferirem em dosagem do catalisador $TiO_2$ (0,01 g) e potência da lâmpada UVC (6 W).

De qualquer modo, é importante ressaltar que o processo degrativo ocorreu nas condições propostas, precisando de ajustes para maior otimização da degração catalítica.

## 3 **CONCLUSÃO**

A prática experimental de degradação do ácido benzoico em um reator fotocatalítico heterogêneo utilizando dióxido de titânio ($TiO_2$) como catalisador permitiu comprovar a eficiência de procesos oxidativos na remoção de compostos orgânicos micropoluentes.

Foi possível correlacionar a absorbância e a concentração do ácido benzoico ao longo do tempo de irradiação e observou-se uma redução progressiva da concentração inicial de 14,32 mg·$L^{-1}$ para 9,87 mg·$L^{-1}$ após 105 minutos de reação, correspondendo a uma eficiência de remoção de 31,1%.

A análise cinética, baseada no modelo de Langmuir–Hinshelwood em condições de baixa concentração de poluente, demonstrou que a degradação do ácido benzoico seguiu uma cinética de primeira ordem, obtendo-se uma constante aparente de velocidade k=0,0037 min−1 e coeficiente de correlação $R^2$=0,9677. O valor de $R^2$ confirma a adequação do modelo cinético adotado e a consistência dos dados obtidos.

O valor experimental de kapp encontra-se dentro da faixa relatada na literatura (0,001–0,01 $min^{-1}$) para reações fotocatalíticas envolvendo $TiO_2$ e compostos aromáticos, indicando que o sistema laboratorial apresentou desempenho compatível com estudos de referência.

Recomenda-se, em estudos futuros, a investigação do efeito de variáveis operacionais (pH, concentração de $TiO_2$, intensidade luminosa e tempo de irradiação) a fim de otimizar a eficiência global do processo.

## REFERÊNCIAS

BACCARO, Alexandre Luiz Bonizio; CORDON, Lucas D.; NISHIMURA, Felipe G.; GUTZ, Ivano G. R. Fotocatálise mediada por $TiO_2$ no estado nanoparticulado: revisão da reatividade pelo conceito de traps e algumas aplicações em química analítica. Química Nova, v. 42, n. 3, p. 329–345, 2019. Disponível em: https://quimicanova.sbq.org.br/detalhe_artigo.asp?id=6887. Acesso em: 22 out. 2025.

CERVANTES, Thiago N. M.; ZAIA, Dimas A. M.; SANTANA, Henrique de. Estudo da fotocatálise heterogênea sobre Ti/$TiO_2$ na descoloração de corantes sintéticos. Química Nova, v. 32, n. 9, p. 2423–2428, 2009. Disponível em: https://www.scielo.br/j/qn/a/VTsp6YNbLJK8tHhpfJqkZxw/?format=pdf. Acesso em: 23 out. 2025.

CHIAVENATO, Fernanda Frerichs. Aplicação do processo de fotocatálise heterogênea para degradação do triclosan. 2017. 55 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Química) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Ponta Grossa, 2017. Disponível em: https://repositorio.utfpr.edu.br/jspui/handle/1/16578. Acesso em: 23 out. 2025

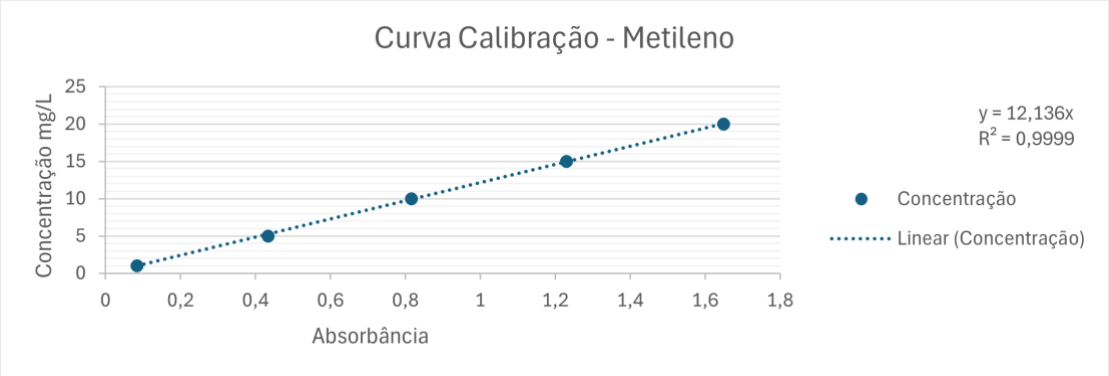
FERREIRA, Ivete Vasconcelos Lopes; DANIEL, Luiz Antonio. Fotocatálise heterogênea com $TiO_2$ aplicada ao tratamento de esgoto sanitário secundário. Engenharia Sanitária e Ambiental, v. 9, n. 4, p. 292–298, 2004. Disponível em: https://doi.org/10.1590/S1413-41522004000400011. Acesso em: 22 out. 2025.

PEREIRA, Gabriel Rodrigues Pinto; SILVA, Thiago Lopes da; VIEIRA, Melissa Gurgel Adeodato. Remoção de ácido benzóico via oxidação avançada utilizando catalisador verde de dióxido de titânio. Campinas: UNICAMP, Faculdade de Engenharia Química, 2025. Disponível em: https://prp.unicamp.br/inscricao-congresso/resumos/2025P24365A40673O522.pdf. Acesso em: 22 out. 2025.

SPAZZINI, Fabíola Cristina Ricci. Efeito da oxidabilidade e susceptibilidade eletrofílica de compostos orgânicos aromáticos e fármacos em suas degradações por fotocatálise mediada por $TiO_2$. 2018. 123 f. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Materiais) – Faculdade de Ciências, Universidade Estadual Paulista, Bauru, 2018. Disponível em: https://repositorio.unesp.br/items/32045bed-ba14-4a13-8edc-3fafda77e167/full. Acesso em: 24 out. 2025.

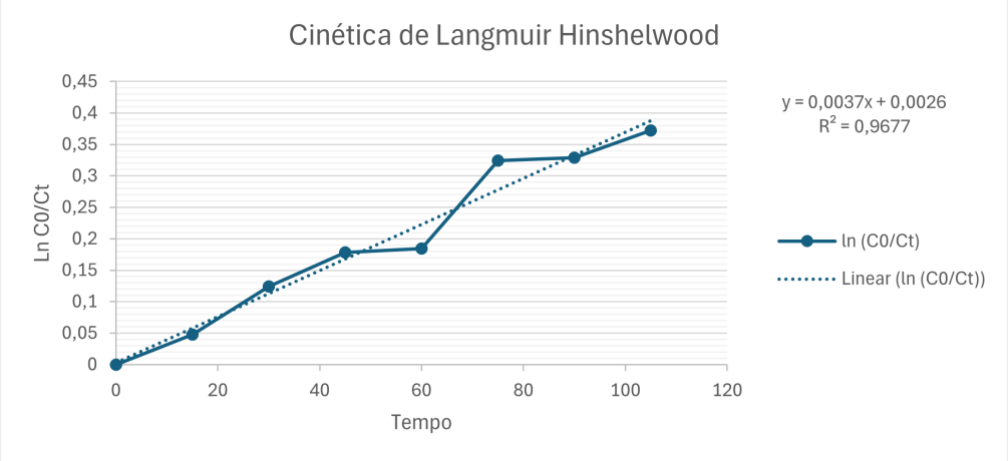
Sobre o(s) autor(es)
(1) Aluno do curso de gradução em Engenharia Química, UNOESC Videira, joaovitorschuppel@hotmail.com;
(2) Aluno do Curso de graduação em Engenharia Quimica, UNOESC Videira matheus.delavieri@unoesc.edu.br;
(3) Aluno do curso de graduação em Engenharia Quimica, UNOESC Videira, nardi.rodrigo@hotmail.com;
(4) Docente do curso de graduação em Engenharia Química, UNOESC Videira, evandro.balestrin@unoesc.edu.br;

Gráfico 1 - Curva de Calibração para o ácido benzóico.




Fonte: Os autores, 2025.

Gráfico 2 - Cinética de Langmuir-Hinschelwood para degradação fotocatalítica heterôgenea do ácido benzóico.




Fonte: Os autores, 2025.

Fotografia 1 - Soluções Padrão para Construção da Curva de Calibração.




Fonte: Os autores, 2025.

Fotografia 2 - Sistema Reator Fotocatalítico Heterogêneo.



Fonte: Os autores, 2025.

Fotografia 3 - Sistema de medição por Espectofotometria UV-Vis.



Fonte: Os autores, 2025.

Fonte: