CINÉTICA DE ADSORÇÃO DO CORANTE CRISTAL VIOLETA PELO COMPÓSITO CaAQ

Manuela Moura Amorim[1], Joyce de Almeida Carminati[1], Amanda Vargas dos Passos[1], Lucas Destefani Paquini[2], Allan Santos Silva[1], Demetrius Profeti[1], Luciene Paula Roberto Profeti[1].

[1]Universidade Federal do Espírito Santo. Alto Universitário s/n – Guararema, 29500-000, Alegre, Espírito Santo, Brasil, manuamorim94@gmail.com, joyceacarminati@gmail.com, amandavargas516@gmail.com, allan.silva.79@edu.ufes.br, demetrius.profeti@ufes.br, luciene.profeti@ufes.br.
[2]Universidade de São Paulo/, Avenida Trabalhador São Carlense, 400, Parque Arnold Schimidt – 13566-590 - São Carlos-SP, Brasil, lucasdestefanip@hotmail.com

Resumo
O cristal violeta (CV) é um corante catiônico utilizado em diferentes setores industriais e sua presença em corpos hídricos pode causar impactos ambientais. Este trabalho teve como objetivo avaliar a cinética de adsorção do CV pelo compósito de alginato de cálcio e quartzito (CaAQ) em meio aquoso. O quartzito, proveniente de resíduo do beneficiamento de rochas ornamentais, foi submetido a tratamento alcalino e incorporado ao alginato de cálcio para obtenção do compósito. Os ensaios foram realizados utilizando 0,025 g de CaAQ e 10,0 mL de solução de CV a 200 mg L^{-1}, sob agitação de 100 rpm e temperatura de 25 °C, em tempos de contato de 3 a 300 min. Os dados experimentais foram ajustados aos modelos de pseudo-primeira ordem (PPO), pseudo-segunda ordem (PSO), Elovich e Avrami. A adsorção foi mais rápida nos primeiros 30 min, seguida de redução da taxa até aproximadamente 180 min. O modelo de Avrami apresentou o melhor ajuste, com R^2 ajustado de 0,99602 e χ^2 de 1,665, indicando maior adequação para descrever a cinética do sistema CaAQ/CV nas condições avaliadas.

Palavras-chave: Alginato de cálcio. Quartzito. Tratamento de águas. Cinética. Adsorvente.

Área do Conhecimento: Engenharias. Engenharia Química.

Introdução

O corante CV, também conhecido como violeta de genciana, é um corante catiônico pertencente à classe dos triarilmetanos, utilizado em diferentes aplicações industriais, incluindo as indústrias têxtil, de papel e impressão, além de aplicações em coloração biológica. Entretanto, sua presença em corpos hídricos pode causar impactos ambientais devido à sua persistência e toxicidade. Além disso, a presença de corantes na água pode reduzir a penetração da luz e interferir na atividade fotossintética de organismos aquáticos (Alghamdi *et al*., 2021; Ganea *et al*., 2021).

O CV apresenta massa molar de aproximadamente 407,98 g mol^{-1} (Alghamdi *et al*., 2021). Esse corante é empregado em estudos de adsorção para avaliação do desempenho de diferentes materiais adsorventes, sendo sua remoção investigada sob diferentes condições experimentais (Al-Saeedi *et al*., 2023). Dessa forma, a análise de materiais alternativos para sua remoção contribui para o desenvolvimento de estratégias destinadas ao tratamento de águas contaminadas por esse corante.

Dentre as alternativas para tratamento de águas contaminadas, a adsorção apresenta vantagens relacionadas à simplicidade operacional, eficiência e possibilidade de utilização de diferentes materiais como adsorventes (Alghamdi *et al*., 2021). Nesse contexto, a associação entre biopolímeros e resíduos minerais pode resultar em materiais com características favoráveis à remoção de contaminantes. O alginato pode ser reticulado na presença de íons Ca^{2+}, formando estruturas tridimensionais estáveis, enquanto o quartzito, rico em SiO_2, pode ser obtido como resíduo do processamento de rochas ornamentais e apresenta potencial de aproveitamento na obtenção de materiais adsorventes (Georgin *et al*., 2026; Figueiredo; Dotto; Foletto, 2026). A combinação desses materiais possibilita a obtenção do compósito CaAQ, reunindo as características do alginato às propriedades do quartzito.

Além da eficiência de remoção, a compreensão da velocidade com que ocorre a adsorção é uma informação importante para avaliar o desempenho de um adsorvente e estabelecer condições

adequadas de operação. O estudo cinético permite acompanhar a variação da capacidade de adsorção em função do tempo de contato e fornece informações sobre o comportamento do processo. A avaliação de modelos cinéticos permite analisar matematicamente os dados experimentais e obter informações sobre a velocidade e as etapas envolvidas no processo de adsorção (Vareda, 2023). A determinação do tempo necessário para que o sistema se aproxime do equilíbrio também auxilia na definição das condições experimentais empregadas nos estudos de adsorção (Saidi et al., 2025). Diante disso, este trabalho teve como objetivo avaliar a cinética de adsorção do CV pelo compósito CaAQ em meio aquoso, investigando a evolução da capacidade de adsorção em função do tempo de contato e o ajuste dos dados experimentais aos modelos cinéticos de PPO, PSO, Elovich e Avrami.

Metodologia

O quartzito utilizado neste estudo foi obtido como resíduo do corte de blocos de rochas ornamentais por fio diamantado, em uma indústria de beneficiamento localizada em Cachoeiro de Itapemirim, Espírito Santo, Brasil. Após a coleta, o material foi filtrado, lavado com água de osmose reversa (5,4 $\mu S\ cm^{-1}$) e seco a 105 °C por 24 horas. Posteriormente, 65 g do resíduo foram submetidos a tratamento alcalino com 300 mL de NaOH 25% (m/V), em béquer de politetrafluoretileno (PTFE), mantido em sistema fechado, à temperatura ambiente por 72 h. Ao final do tratamento, o sólido foi separado por filtração a vácuo, lavado e submetido à estabilização até pH neutro.

O compósito CaAQ foi preparado a partir da dissolução de 3,20 g de alginato de sódio (NaA) (Dinâmica Química Contemporânea LTDA, 90% de pureza) em 160 mL de água de osmose reversa sob agitação magnética por 60 min. Em seguida, 8,0 g do quartzito tratado foram incorporados à solução, mantendo-se a suspensão sob agitação por mais 60 min. A suspensão aquosa NaA/quartzito foi então adicionada lentamente a 800 mL de uma solução contendo 16,01 g de $CaCl_2$ promovendo a formação das estruturas esferoidais do compósito. O material permaneceu sob agitação por 15 min, sendo posteriormente separado por filtração a vácuo e lavado com água de osmose reversa.

Os ensaios de cinética de adsorção foram realizados utilizando 0,025 g de CaAQ, massa previamente estabelecida nos ensaios de dosagem do adsorvente, em Erlenmeyers de 100 mL, aos quais foram adicionados, após a pesagem, 10,0 mL da solução de CV com a concentração de 200 $mg\ L^{-1}$. Os sistemas foram mantidos sob agitação orbital a 100 rpm e temperatura de 25 °C.

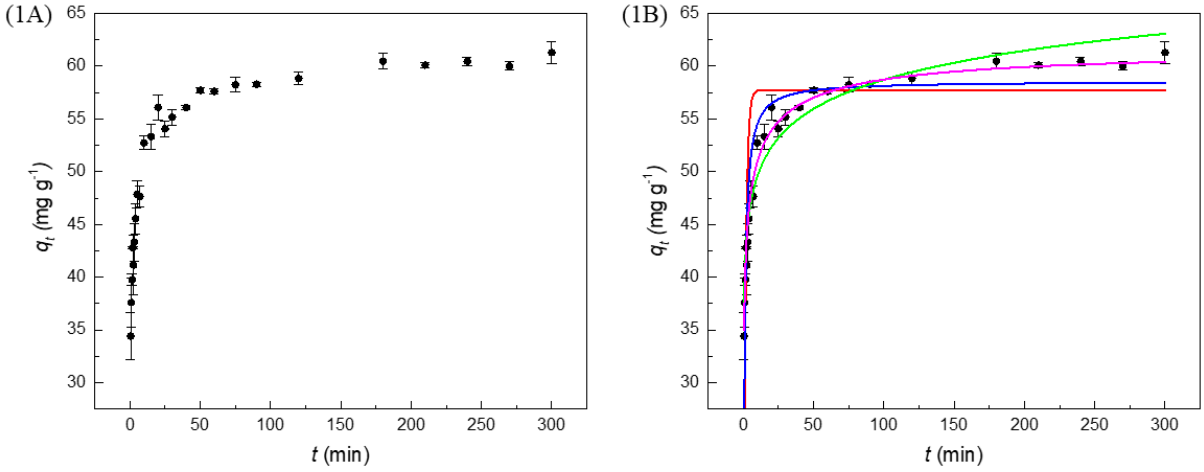
As amostras foram retiradas em tempos de contato predefinidos variando de 3 a 300 min, filtradas e analisadas em um espectrofotômetro de absorção UV-Vis da Thermo-Fischer Scientific™ (GENESYS™ 10S), no comprimento de onda de 582 nm.

Os dados experimentais foram ajustados aos modelos cinéticos de PPO, PSO, Elovich e Avrami. A qualidade dos ajustes foi avaliada por meio do coeficiente de determinação ajustado (R^2aj) e do qui-quadrado (χ^2), visando identificar o modelo que melhor representa o comportamento cinético da adsorção do CV pelo compósito CaAQ (Vareda, 2023).”

Resultados

A capacidade de adsorção do compósito (qt) foi determinada para cada tempo de contato, considerando a concentração de CV obtida ao final de cada ensaio. A evolução de qt em função do tempo de contato, sob temperatura constante de 25 °C, é apresentada na Figura 1A. Na Figura 1B, são apresentados os ajustes não lineares dos dados experimentais aos modelos cinéticos avaliados.

Figura 1 – (A) Comportamento cinético da adsorção a 25 °C. (B) Ajuste de regressão não linear dos dados experimentais a 25 °C aos modelos de PPO, PSO, Elovich e Avrami.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Na Tabela 1, são apresentados os parâmetros cinéticos obtidos por regressão não linear dos dados experimentais à temperatura de 25 °C.

Tabela 1 – Parâmetros cinéticos obtidos por regressão não linear dos dados experimentais a 25 °C.

PPO	**25°C**
k_1 (min^{-1})	0,68042 ± 0,02
q_e (mg g^{-1})	57,72108 ± 0,4
R^2_{adj}	0,93065
χ^2	28,97673
PSO	
k_2 (g mg^{-1} min^{-1})	0,02296 ± 0,0010
q_e (mg g^{-1})	58,56747 ± 0,0317
R^2_{adj}	0,972
χ^2	11,69951
Elovich	
α (mg g^{-1} min^{-1})	103797,38622 ± 42997,87515
β (mg g^{-1})	0,25166 ± 0,0083
R^2_{adj}	0,97431
χ^2	10,73512
Avrami	
k_{AV} (min^{-1})	1,00104 ± 0,01281
q_e (mg g^{-1})	61,40575 ± 0,52095
n_{AV}	0,24783 ± 0,01052
R^2_{adj}	0,99602
χ^2	1,665

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Entre os modelos cinéticos avaliados, o modelo de Avrami apresentou o maior coeficiente de determinação ajustado (R^2=0,99602), e o menor valor de χ^2 (1,665), indicando o melhor ajuste aos dados experimentais entre os modelos avaliados.

Discussão

A cinética de adsorção permite avaliar a velocidade de remoção do adsorvato e o tempo necessário para que o sistema se aproxime do equilíbrio, além de fornecer informações sobre as etapas envolvidas no processo. Na Figura 1A, observou-se que a adsorção do CV pelo CaAQ foi mais rápida nos primeiros 30 min, com aumento de q_t de aproximadamente 34,00 para 56,11 mg g^{-1}. Após esse período, a velocidade de adsorção diminuiu, atingindo valores próximos a 60,00 mg g^{-1} a partir de aproximadamente 180 min, com discreta variação até 300 min. Esse comportamento pode estar relacionado à maior disponibilidade de sítios de adsorção nos estágios iniciais, seguida pela ocupação progressiva desses sítios e pela aproximação do sistema ao equilíbrio (Foroutan *et al*., 2021).

De modo geral, o comportamento observado indica a ocorrência de diferentes etapas ao longo do processo de adsorção. Inicialmente, as moléculas de CV presentes na solução são transferidas para a superfície do CaAQ, onde interagem com os sítios de adsorção disponíveis. A cinética pode envolver diferentes etapas de transferência de massa, incluindo o transporte do adsorvato até a superfície e a difusão em regiões internas do adsorvente, de modo que mais de uma etapa pode contribuir para o comportamento observado (Vareda, 2023). Com o avanço do processo, a menor disponibilidade de sítios contribui para a diminuição da taxa de adsorção e para a aproximação do equilíbrio (Foroutan *et al* 2021). A velocidade de adsorção também pode ser influenciada pelas condições experimentais, como concentração inicial do adsorvato, pH e temperatura (Vojnović *et al*., 2022). Essas variáveis podem modificar o comportamento da adsorção ao longo do tempo.

A comparação dos modelos cinéticos mostrou que o modelo de Avrami apresentou o melhor ajuste aos dados experimentais, com R^2 ajustado de 0,99602 e o menor valor de χ^2, igual a 1,665. Em comparação, os modelos de PPO, PSO e Elovich apresentaram valores de R^2 ajustado de 0,93065, 0,97200 e 0,97431, respectivamente. A maior capacidade do modelo de Avrami em representar os dados sugere que o comportamento cinético do sistema CaAQ/CV pode envolver diferentes contribuições ao longo do tempo. Esse modelo tem sido empregado na descrição da adsorção de corantes em solução aquosa e pode representar processos nos quais diferentes ordens cinéticas contribuem ao longo da adsorção (Kuete *et al*., 2020; Ouakouak *et al*., 2021).

O ajuste pelo modelo de Avrami resultou em nAV de 0,24783 ± 0,01052, kAV de 1,00104 ± 0,01281 min^{-1} e qe estimado de 61,40575 ± 0,52095 mg g^{-1}. O valor de nAV é coerente com a representação de uma cinética de ordem fracionária, não restrita a uma única ordem inteira de reação (Santos *et al*., 2025). Além disso, o qe estimado pelo modelo foi próximo aos valores de qt observados experimentalmente nos maiores tempos de contato, indicando boa concordância entre o ajuste e os dados experimentais. O desempenho dos diferentes modelos cinéticos deve ser avaliado a partir da qualidade do ajuste aos dados experimentais, uma vez que modelos distintos podem apresentar diferentes desempenhos na representação dos dados (Tran, 2023).

A predominância do modelo de Avrami para o sistema CaAQ/CV também está de acordo com a observação de que diferentes modelos cinéticos podem apresentar melhor ajuste dependendo das características do sistema adsorvente–adsorvato e das condições experimentais. Estudos envolvendo materiais à base de alginato e compósitos contendo resíduos de quartzito também apresentam diferentes comportamentos cinéticos, sendo relatados ajustes por diferentes modelos na descrição dos processos de adsorção (Asadi *et al*., 2018; Paquini *et al*., 2026). Assim, os resultados obtidos indicam que o modelo de Avrami é o mais adequado para descrever a cinética de adsorção do CV pelo CaAQ nas condições avaliadas.

Conclusão

O estudo demonstrou que a adsorção do corante CV pelo compósito CaAQ ocorreu de forma mais rápida nos primeiros minutos, seguida por uma redução gradual da taxa de adsorção até a aproximação do equilíbrio. Entre os modelos cinéticos avaliados, o modelo de Avrami apresentou o melhor ajuste aos dados experimentais, com R^2 ajustado de 0,99602 e menor valor de χ^2 (1,665), indicando maior adequação para descrever o comportamento cinético do sistema CaAQ/CV nas condições avaliadas. O valor de nAV obtido é coerente com a possibilidade de contribuições de diferentes processos ao longo da adsorção. Dessa forma, o modelo de Avrami mostrou-se o mais adequado para representar a cinética de adsorção do CV pelo CaAQ nas condições avaliadas, contribuindo para a compreensão do comportamento cinético desse sistema.

Referências

ALGHAMDI, A. A. *et al.* Adsorptive performance of polypyrrole-based KOH-activated carbon for the cationic dye crystal violet: kinetic and equilibrium studies. **Adsorption Science & Technology**, v. 2021, p. 1–11, 2021.

AL-SAEEDI, S. I.; ASHOUR, M.; ALPROL, A. E. Adsorption of toxic dye using red seaweeds from synthetic aqueous solution and its application to industrial wastewater effluents. **Frontiers in Marine Science**, v. 10, 1202362, 2023.

ASADI, S.; ERIS, S.; AZIZIAN, S. Alginate-based hydrogel beads as a biocompatible and efficient adsorbent for dye removal from aqueous solutions. **ACS Omega**, v. 3, n. 11, p. 15140–15148, 2018.

FIGUEIREDO, P. S.; DOTTO, G. L.; FOLETTO, E. L. Applicability of granite and quartzite residues in the development of porous adsorbents for effective organic pollutant removal. **Environmental Science and Pollution Research**, v. 33, p. 9609–9625, 2026.

FOROUTAN, R. *et al.* Adsorption of crystal violet dye using activated carbon of lemon wood and activated carbon/Fe_3O_4 magnetic nanocomposite from aqueous solutions: a kinetic, equilibrium and thermodynamic study. **Molecules**, v. 26, n. 8, 2241, 2021.

GANEA, I.-V. *et al.* Effective removal of crystal violet dye using neoteric magnetic nanostructures based on functionalized poly (benzofuran-co-arylacetic acid): investigation of the adsorption behaviour and reusability. **Nanomaterials**, v. 11, n. 3, 679, 2021.

GEORGIN, J. *et al.* Alginate-calcium composites: advances in design, functional properties, and applications in biomedicine and environmental remediation. **Carbohydrate Research**, v. 565, 109932, 2026.

KUETE, I.-H. T. *et al.* Kinetic, isotherm and thermodynamic studies of the adsorption of thymol blue onto powdered activated carbons from *Garcinia cola* nut shells impregnated with H_3PO_4 and KOH: non-linear regression analysis. **Journal of Encapsulation and Adsorption Sciences**, v. 10, n. 1, p. 1 –27, 2020.

OUAKOUAK, A. et al. Development of a novel adsorbent prepared from dredging sediment for effective removal of dye in aqueous solutions. **Applied Sciences**, v. 11, n. 22, 10722, 2021.

PAQUINI, L. D. et al. Quartzite waste–based composite: an environmental and renewable material for the adsorptive removal of industrial dyes. **Advances in Materials Science and Engineering**, v. 2026, n. 1, 4755331, 2026.

SAIDI, M. et al. Kinetics thermodynamics and adsorption study of raw treated diatomite as a sustainable adsorbent for crystal violet dye. **Scientific Reports**, v. 15, 21991, 2025.

SANTOS, M. G. dos et al. Insights into kinetics and thermodynamics for adsorption methylene blue using ecofriendly zeolites materials. **ACS Omega**, v. 10, n. 20, p. 20326–20340, 2025.

TRAN, H. N. Applying linear forms of pseudo-second-order kinetic model for feasibly identifying errors in the initial periods of time-dependent adsorption datasets. **Water**, v. 15, n. 6, 1231, 2023.

VAREDA, J. P. On validity, physical meaning, mechanism insights and regression of adsorption kinetic models. **Journal of Molecular Liquids**, v. 376, 121416, 2023.

VOJNOVIĆ, B. et al. Influence of initial pH value on the adsorption of reactive black 5 dye on powdered activated carbon: kinetics, mechanisms, and thermodynamics. **Molecules**, v. 27, n. 4, 1349, 2022.

Agradecimentos

Agradecemos à Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), à CAPES, ao CNPq e à FAPES. Este estudo foi financiado em parte pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código Financeiro 001.