Resumo nº 38

ADSORÇÃO DE CAFEÍNA EM CARVÃO ATIVADO: ESTUDO DE EQUILÍBRIO E MODELAGEM MATEMÁTICA

Débora Fernanda Capra[1], Alica Antônia Dutra[2], Luiz Jardel Visioli[3]

1 Bolsista IC/UDESC/CEO

2 Estudante UDESC/CEO

3 Professor Coordenador do projeto UDESC/CEO

INTRODUÇÃO

A crescente preocupação com a qualidade da água tem impulsionado pesquisas voltadas à remoção de contaminantes emergentes, como fármacos e compostos farmacologicamente ativos, frequentemente detectados em águas superficiais e subterrâneas (Hu et al., 2025). Nesse contexto, a adsorção destaca-se como uma alternativa eficiente e de fácil implementação para a remoção de contaminantes em meio aquoso (Do et al., 2026). A eficiência desse processo depende das características físico-químicas do adsorvente e do adsorbato, além de fatores operacionais, como concentração inicial e tempo de contato.

A modelagem das isotermas de adsorção é uma ferramenta importante para compreender o equilíbrio do processo e determinar parâmetros relacionados à capacidade e à afinidade do adsorvente pelo contaminante (Acharya et al., 2024). Entre os modelos empregados, a isoterma de Langmuir considera a formação de uma monocamada de adsorbato sobre uma superfície com sítios de adsorção energeticamente equivalentes. A utilização de regressão não linear permite estimar diretamente os parâmetros do modelo a partir dos dados experimentais, evitando possíveis distorções associadas à linearização da equação.

A cafeína é um dos compostos psicoativos mais consumidos mundialmente e apresenta ocorrência frequente em efluentes e corpos hídricos, sendo considerada um contaminante emergente de relevância ambiental (Oni et al., 2022). Nesse sentido, diferentes materiais adsorventes têm sido investigados para sua remoção, destacando-se o carvão ativado devido à sua elevada capacidade de adsorção. Onaga Medina et al. (2021) estudaram a adsorção de cafeína e diclofenaco em carvão ativado, evidenciando a afinidade desse material pelos contaminantes.

Diante desse contexto, este trabalho teve como objetivo avaliar a adsorção monocomponente de cafeína em carvão ativado por meio do modelo de Langmuir, utilizando regressão não linear para determinar os parâmetros de equilíbrio e avaliar a capacidade de adsorção do material.

DESENVOLVIMENTO

Para a realização do estudo, utilizou-se carvão ativado comercial como adsorvente para a remoção de cafeína em solução aquosa. Inicialmente, foi construída uma curva de calibração para a cafeína, relacionando a absorbância, medida em espectrofotômetro UV-Vis, à concentração. A curva apresentou boa linearidade, com coeficiente de determinação (R^2) de 0,9995, indicando adequação para a quantificação da cafeína nas amostras.

Os experimentos em batelada foram conduzidos à temperatura de 30 °C, variando-se a massa de carvão ativado de 0,01 a 0,10 g em um volume fixo de 100 mL de solução, com concentração inicial de cafeína de 77,12 mg/L. Após o tempo de contato, as amostras foram filtradas e a absorbância da solução remanescente foi determinada, permitindo o cálculo da concentração de equilíbrio (Ce) e da

capacidade de adsorção no equilíbrio (qe), expressa em mg/g. Os ensaios foram realizados em triplicata para avaliar a reprodutibilidade dos resultados.
Os dados experimentais de equilíbrio foram ajustados ao modelo de isoterma de Langmuir por meio de regressão não linear no software Scilab, utilizando o método dos mínimos quadrados para estimar os parâmetros de capacidade máxima de adsorção (q_{max}) e constante de afinidade (b). A qualidade do ajuste foi avaliada por meio do coeficiente de determinação (R^2), erro médio absoluto (MAE) e erro quadrático médio (MSE). A partir dos parâmetros obtidos, foi gerada a curva teórica de Langmuir, posteriormente comparada aos dados experimentais e às respectivas barras de desvio padrão.

RESULTADOS

Os experimentos de adsorção de cafeína em carvão ativado, realizados em triplicata a 30°C, permitiram obter as capacidades de adsorção no equilíbrio (qe) para diferentes concentrações residuais (Ce). A curva de calibração utilizada para quantificação da cafeína apresentou excelente linearidade, com coeficiente de determinação $R^2 = 0,9995$, garantindo a confiabilidade das análises espectrofotométricas. Os dados experimentais de equilíbrio são apresentados na Tabela 1. Observa-se que a capacidade de adsorção da cafeína aumenta com o aumento da concentração residual, comportamento típico de sistemas de adsorção. Os desvios padrão reduzidos, com exceção do primeiro ponto experimental (que apresentou maior dispersão devido à menor massa de adsorvente utilizada), confirmam a reprodutibilidade dos ensaios.
Os dados experimentais foram ajustados ao modelo de isoterma de Langmuir, resultando nos seguintes parâmetros: capacidade máxima de adsorção (q_{max}) = 250,00 mg/g e constante de afinidade (b) = 0,058 L/mg. O elevado valor de q_{max} indica alta capacidade do carvão ativado para remoção de cafeína, evidenciando seu potencial como adsorvente para tratamento de águas contaminadas com esse poluente emergente.
A qualidade do ajuste do modelo de Langmuir aos dados experimentais foi avaliada por meio das seguintes métricas: coeficiente de determinação (R^2) = 0,988, erro médio absoluto (MAE) = 4,17 mg/g e erro quadrático médio (MSE) = 29,12 $(mg/g)^2$. O elevado valor de R^2, próximo à unidade, indica que o modelo de Langmuir descreve satisfatoriamente o comportamento de adsorção da cafeína nas condições estudadas, sugerindo que o processo ocorre em monocamada sobre uma superfície homogênea.
A Figura 1 apresenta a isoterma de adsorção da cafeína, comparando os dados experimentais (com barras de desvio padrão) com a curva ajustada pelo modelo de Langmuir. Observa-se visualmente boa concordância entre o modelo e os dados experimentais, confirmando a adequação do modelo para descrever o processo de adsorção. A curva apresenta formato característico do tipo L, com inclinação inicial acentuada, indicando alta afinidade entre a cafeína e o carvão ativado, seguida de um patamar de saturação que se aproxima da capacidade máxima de adsorção.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados obtidos demonstraram que o carvão ativado apresenta elevada capacidade de adsorção para a cafeína, com q_{max} de 250,00 mg/g, indicando seu potencial como adsorvente para remoção desse contaminante em águas. O modelo de Langmuir ajustou-se adequadamente aos dados experimentais ($R^2 = 0,988$), sugerindo que o processo de adsorção ocorre em monocamada sobre superfície homogênea, sem interações significativas entre as moléculas adsorvidas. Os baixos valores de erro (MAE = 4,17 mg/g e MSE = 29,12 $(mg/g)^2$) confirmam a qualidade do ajuste e a reprodutibilidade dos experimentos. Dessa forma, o estudo contribui para o desenvolvimento de tecnologias de tratamento de água visando à remoção de contaminantes emergentes, como a cafeína, e fornece parâmetros importantes para projetos de sistemas de adsorção em escala real.

Palavras-chave: adsorção; cafeína; carvão ativado; isoterma de Langmuir; modelagem matemática.

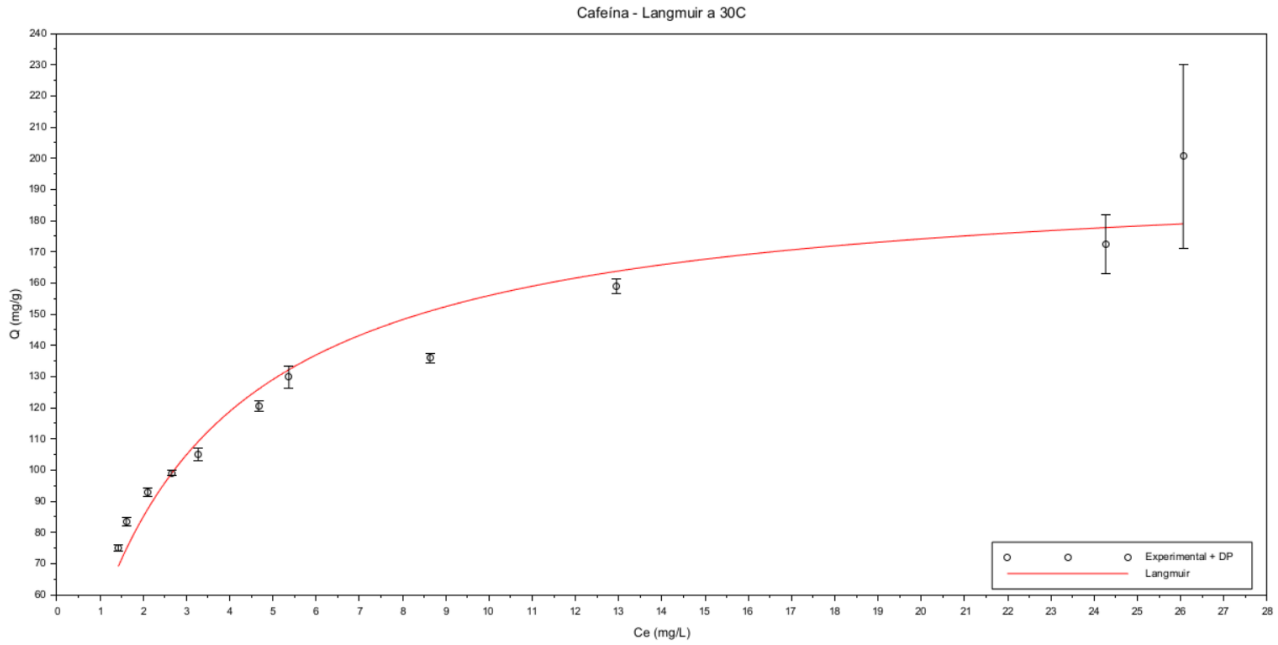
ANEXOS

Tabela 1. *Dados experimentais de equilíbrio para adsorção de cafeína em carvão ativado a 30°C*

Ce (mg/L)	qe (mg/g)	Desvio Padrão
26,06	200,57	± 29,63
24,26	172,49	± 9,36
12,95	158,84	± 2,31
8,63	135,99	± 1,53
5,37	129,83	± 3,57
4,67	120,55	± 1,58
3,27	105,05	± 2,04
2,65	99,07	± 0,84
2,11	92,84	± 1,31
1,61	83,35	± 1,29
1,42	75,12	± 1,02

Fonte: Autores (2026).

Figura 1. *Isoterma de adsorção de Langmuir para cafeína em carvão ativado a 30°C.*



Fonte: Autores (2026).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ACHARYA, A. et al. Adsorption of arsenic and fluoride: modeling of single and competitive adsorption systems. Heliyon, v. 10, e31967, 2024. DOI: https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e31967.

BERBER-MENDOZA, M. S. et al. Competitive adsorption of heavy metals from aqueous solution onto oxidized activated carbon fiber. Water, Air, & Soil Pollution, v. 229, 257, 2018. DOI: https://doi.org/10.1007/s11270-018-3901-6.

DO, T. H. et al. ZnO-modified activated carbon derived from rambutan (Nephelium lappaceum) peel and seeds for efficient methylene blue removal: adsorption mechanism and artificial neural network modeling. RSC Advances, v. 16, p. 18422-18453, 2026. DOI: https://doi.org/10.1039/d6ra01824f.

HU, Q. et al. A state-of-the-art review of explicit multicomponent isotherm models for the modeling of equilibrium data: from fundamentals to applications. Separation and Purification Technology, v. 363, 132202, 2025. DOI: https://doi.org/10.1016/j.seppur.2025.132202.

ONAGA MEDINA, F. M. et al. Insights of competitive adsorption on activated carbon of binary caffeine and diclofenac solutions. Journal of Environmental Management, v. 278, 111523, 2021. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2020.111523.

ONI, B. A. et al. Decaffeination of wastewater using activated carbon produced from velvet tamarind-pericarp (Dialium guineense). International Journal of Phytoremediation, v. 24, n. 4, p. 394-408, 2022. DOI: https://doi.org/10.1080/15226514.2021.1952921.

SHEINDORF, C.; REBHUN, M.; SHEINTUCH, M. A Freundlich-type multicomponent isotherm. Journal of Colloid and Interface Science, v. 79, n. 1, p. 136-142, 1981. DOI: https://doi.org/10.1016/0021-9797(81)90056-4.