

Ciência e Engenharia de Materiais

4

Marcia Regina Werner Schneider Abdala
(Organizadora)

 **Atena**
Editora

Ano 2018

MARCIA REGINA WERNER SCHNEIDER ABDALA

(Organizadora)

Ciência e Engenharia de Materiais

4

Atena Editora

2018

2018 by Atena Editora

Copyright © da Atena Editora

Editora Chefe: Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

Diagramação e Edição de Arte: Geraldo Alves e Natália Sandrini

Revisão: Os autores

Conselho Editorial

Prof. Dr. Alan Mario Zuffo – Universidade Federal de Mato Grosso do Sul
Prof. Dr. Álvaro Augusto de Borba Barreto – Universidade Federal de Pelotas
Prof. Dr. Antonio Carlos Frasson – Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Prof. Dr. Antonio Isidro-Filho – Universidade de Brasília
Profª Drª Cristina Gaio – Universidade de Lisboa
Prof. Dr. Constantino Ribeiro de Oliveira Junior – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Profª Drª Daiane Garabeli Trojan – Universidade Norte do Paraná
Prof. Dr. Darllan Collins da Cunha e Silva – Universidade Estadual Paulista
Profª Drª Deusilene Souza Vieira Dall'Acqua – Universidade Federal de Rondônia
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Prof. Dr. Fábio Steiner – Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul
Prof. Dr. Gianfábio Pimentel Franco – Universidade Federal de Santa Maria
Prof. Dr. Gilmei Fleck – Universidade Estadual do Oeste do Paraná
Profª Drª Girlene Santos de Souza – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia
Profª Drª Ivone Goulart Lopes – Istituto Internazionele delle Figlie de Maria Ausiliatrice
Profª Drª Juliane Sant'Ana Bento – Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Prof. Dr. Julio Candido de Meirelles Junior – Universidade Federal Fluminense
Prof. Dr. Jorge González Aguilera – Universidade Federal de Mato Grosso do Sul
Profª Drª Lina Maria Gonçalves – Universidade Federal do Tocantins
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte
Profª Drª Paola Andressa Scortegagna – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Profª Drª Raissa Rachel Salustriano da Silva Matos – Universidade Federal do Maranhão
Prof. Dr. Ronilson Freitas de Souza – Universidade do Estado do Pará
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista
Prof. Dr. Urandi João Rodrigues Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará
Prof. Dr. Valdemar Antonio Paffaro Junior – Universidade Federal de Alfenas
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande
Profª Drª Vanessa Lima Gonçalves – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Prof. Dr. Willian Douglas Guilherme – Universidade Federal do Tocantins

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) (eDOC BRASIL, Belo Horizonte/MG)

C569 Ciência e engenharia de materiais 4 [recurso eletrônico] / Marcia Regina Werner Schneider Abdala. – Ponta Grossa (PR): Atena Editora, 2018. – (Ciência e Engenharia de Materiais; v. 4)

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Inclui bibliografia

ISBN 978-85-85107-64-2

DOI 10.22533/at.ed.642182910

1. Engenharia. 2. Materiais I. Abdala, Marcia Regina Werner Schneider. II. Série.

CDD 620.11

Elaborado por Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores.

2018

Permitido o download da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

www.atenaeditora.com.br

APRESENTAÇÃO

Você já percebeu a importância dos materiais na sua vida diária? Os materiais estão provavelmente mais imersos na nossa cultura do que a maioria de nós imagina. Diferentes segmentos como habitação, saúde, transportes, segurança, informação/comunicação, vestuário, entre outros, são influenciados em maior ou menor grau pelos materiais.

De fato a utilização dos materiais sempre foi tão importante que os períodos antigos eram denominados de acordo com os materiais utilizados pela sociedade primitiva, como a Idade da Pedra, Idade do Bronze, Idade do Ferro, etc.

A humanidade está em constante evolução, e os materiais não são exceções. Com o avanço da ciência e da tecnologia a cada dia surgem novos materiais com características específicas que permitem aplicações pormenorizadas e inovação nas mais diferentes áreas.

Todos os dias centenas de pesquisadores estão atentos ao desenvolvimento de novos materiais e ao aprimoramento dos existentes de forma a integrá-los em tecnologias de manufatura economicamente eficientes e ecologicamente seguras.

Estamos entrando em uma nova era caracterizada por novos materiais que podem tornar o futuro mais fácil, seguro e sustentável. O campo da Ciência e Engenharia de Materiais aplicada está seguindo por novos caminhos. A iminente escassez de recursos está exigindo inovações e ideias criativas.

Nesse sentido, este livro evidencia a importância da Ciência e Engenharia de Materiais, apresentando uma coletânea de trabalhos, composta por quatro volumes, que permitem conhecer mais profundamente os diferentes materiais, mediante um exame das relações entre a sua estrutura, as suas propriedades e o seu processamento.

Considerando que a utilização de materiais e os projetos de engenharia mudam continuamente e que o ritmo desta mudança se acelera, não há como prever os avanços de longo prazo nesta área. A busca por novos materiais prossegue continuamente...

Boa leitura!

Marcia Regina Werner Schneider Abdala

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1	1
ESTUDO COMPARATIVO DA ABSORÇÃO DE UMIDADE ENTRE COMPÓSITOS POLIMÉRICOS HÍBRIDOS REFORÇADOS COM TECIDOS DE ALTO DESEMPENHO	
<i>Helen Fernandes de Sousa</i>	
<i>Eval Oliveira Miranda Junior</i>	
<i>Ana Claudia Rangel da Conceição</i>	
<i>Victor Antunes Silva Barbosa</i>	
<i>Olímpio Baldoino da Costa Vargens Neto</i>	
<i>Mirtânia Antunes Leão</i>	
CAPÍTULO 2	15
COMPÓSITOS POLIMÉRICOS REFORÇADOS COM TECIDO HÍBRIDO DE KEVLAR-CARBONO: INFLUÊNCIA DA ABSORÇÃO DE UMIDADE NAS PROPRIEDADES MECÂNICAS	
<i>Eval Oliveira Miranda Junior</i>	
<i>Helen Fernandes de Sousa</i>	
<i>Ana Claudia Rangel da Conceição</i>	
<i>Victor Antunes Silva Barbosa</i>	
<i>Olímpio Baldoino da Costa Vargens Neto</i>	
<i>Mirtânia Antunes Leão</i>	
CAPÍTULO 3	25
FRICTION AND WEAR OF NANOCOMPOSITES POLYSTYRENE / KAOLINITE	
<i>José Costa de Macêdo Neto</i>	
<i>Ana Emília Guedes</i>	
<i>Nayra Reis do Nascimento</i>	
<i>João Evangelista Neto</i>	
<i>Waldeir Silva Dias</i>	
<i>Bruno Mello de Freitas</i>	
<i>Solenise Pinto Rodrigues Kimura</i>	
<i>Eduardo Rafael Barreda</i>	
CAPÍTULO 4	33
INFLUÊNCIA DA QUANTIDADE DE CAULIM E DE AGENTE COMPATIBILIZANTE NO ÍNDICE DE FLUIDEZ DE COMPÓSITOS PEAD/CAULIM	
<i>Márcio Alves de Lima</i>	
<i>Gilmara Brandão Pereira</i>	
<i>Ezequiel de Andrade Silva</i>	
<i>Cirlene Fourquet Bandeira</i>	
<i>Roberto de Oliveira Magnago</i>	
<i>Sérgio Roberto Montoro</i>	
CAPÍTULO 5	40
ESTUDO DA INTEGRIDADE ESTRUTURAL EM LAMINADOS COMPÓSITOS POLIMÉRICOS	
<i>Sérgio Renan Lopes Tinô</i>	
<i>Ana Claudia de Melo Caldas Batista</i>	
<i>Raphael Siqueira Fontes</i>	
<i>Eve Maria Freire de Aquino</i>	
CAPÍTULO 6	48
ANÁLISE MECÂNICA DE ESTRUTURAS SANDUÍCHES COM DIFERENTES NÚCLEOS	
<i>Vanessa Cristina Da Costa Oliveira</i>	
<i>Vanessa Maria Yae Do Rosário Taketa</i>	
<i>Carmen Gilda Barroso Tavares Dias</i>	

CAPÍTULO 7 58

MATERIAL COMPÓSITO DE MATRIZ POLIÉSTER REFORÇADOS POR FIBRAS DE ALGODÃO CONTÍNUAS E ALINHADAS

César Tadeu Nasser Medeiros Branco
Wassim Raja El Banna
Deibson Silva da Costa
Roberto Tetsuo Fujiyama

CAPÍTULO 8 66

COMPÓSITO DE BORRACHA NATURAL E RESÍDUO DE COURO APLICADO COMO ISOLANTE TÉRMICO DE EDIFÍCIOS

Maria Alessandra Bacaro Boscoli
Fernando Sérgio Okimoto
Saulo Guths
Guilherme Dognani
Eduardo Roque Budenberg
Ado Eloizo Job

CAPÍTULO 9 82

ANÁLISE COMPARATIVA DE UM MATERIAL COMPÓSITO DE MATRIZ POLIMÉRICA COM DIFERENTES PROPORÇÕES DE FIBRA DE PIAÇAVA DO AMAZONAS.

Waldeir Silva Dias
Bruno Mello de Freitas
José Costa de Macedo Neto
Guilherme Moreira dos Santos
Solenise Pinto Rodrigues Kimura
Sarah Elisa Medeiros
João Christian Paixão Fonseca

CAPÍTULO 10 92

ANALYSIS OF THE STIFFNESS OF DOWEL LAMINATED TIMBER (DLT) PANELS MADE WITH LAMELLAS OF PINUS TAEDA AND ELLIOTTII WITH DOWELS OF PELTOGYNE SPP., LEGUMINOSAE

Marcos Cesar de Moraes Pereira
Carlito Calil Junior

CAPÍTULO 11 98

NANOCOMPÓSITO DE POLÍMERO VERDE: COMPORTAMENTO MECÂNICO E DE INFLAMABILIDADE

Felippe Fabrício dos Santos Siqueira
Renato Lemos Cosse
Joyce Batista Azevedo
Tatianny Soares Alves
Renata Barbosa

CAPÍTULO 12 108

DESENVOLVIMENTO DE NANOCOMPÓSITOS DE POLIPROPILENO/ARGILA BENTONÍTICA ORGANOFÍLICA

Carlos Ivan Ribeiro de Oliveira
Marisa Cristina Guimarães Rocha
Joaquim Teixeira de Assis
Jessica Verly
Ana Lúcia Nazareth da Silva
Luiz Carlos Bertolino

CAPÍTULO 13 123

COMPATIBILIZAÇÃO E EFEITO DA DEGRADAÇÃO TERMO-HIDROLÍTICA EM BLENDS PS/PCL

Danilo Diniz Siqueira
Dayanne Diniz de Souza Moraes

Rodolfo da Silva Barbosa Ferreira
Edcleide Maria Araújo
Danielly Campos França
Elieber Barros Barbosa
Amanda Dantas Oliveira

CAPÍTULO 14..... 139

MEMBRANAS DE FIBRA OCA DE CARBETO DE SILÍCIO: OBTENÇÃO E CARACTERIZAÇÃO

Sandriely Sonaly Lima Oliveira
Rodolfo da Silva Barbosa Ferreira
Bruna Aline Araújo
Keila Machado de Medeiros
Hélio de Lucena Lira
Edcleide Maria Araújo

CAPÍTULO 15..... 150

OBTENÇÃO DE NANOFIBRAS DE SÍLICA PELO MÉTODO SBS E INVESTIGAÇÃO PRELIMINAR DE SUA APLICAÇÃO COMO CARGA EM MATRIZ POLIMÉRICA

Edvânia Trajano Teófilo
Gabriel Lucena de Oliveira
Radamés da Silva Teixeira
Francisco Diassis Cavalcante da Silva
Rosiane Maria da Costa Farias
Romualdo Rodrigues Menezes

CAPÍTULO 16..... 161

SINERGISMO ENTRE AS PROPRIEDADES ÓPTICAS E FOTOCATALÍTICAS DE FIBRAS DOS ÓXIDOS DE TITÂNIO E TUNGSTÊNIO

Luana Góes Soares da Silva
Annelise Kopp Alves

CAPÍTULO 17..... 177

ADSORÇÃO DO POLI (3-OCTILTIOFENO) EM ÓXIDO DE ZINCO PARA USO EM CÉLULAS SOLARES

Guilherme Arielo Rodrigues Maia
Guilherme José Turcatel Alves
Bianca Vanjura Dias
Gideã Taques Tractz
Leticia Fernanda Gonçalves Larsson
Everson do Prado Banczek
Sandra Regina Masetto Antunes
Paulo Rogério Pinto Rodrigues

SOBRE A ORGANIZADORA..... 186

ADSORÇÃO DO POLI (3-OCTILTIOFENO) EM ÓXIDO DE ZINCO PARA USO EM CÉLULAS SOLARES

Guilherme Arielo Rodrigues Maia

Universidade Estadual do Centro-Oeste,
Departamento de Química
Guarapuava - Paraná

Guilherme José Turcatel Alves

Instituto Federal de Roraima, Departamento de
Química
Novo Paraíso - Roraima

Bianca Vanjura Dias

Universidade Estadual do Centro-Oeste,
Departamento de Química
Guarapuava – Paraná

Gideã Taques Tractz

Universidade Estadual do Centro-Oeste,
Departamento de Química
Guarapuava – Paraná

Leticia Fernanda Gonçalves Larsson

Universidade Estadual do Centro-Oeste,
Departamento de Química
Guarapuava - Paraná

Everson do Prado Banczek

Universidade Estadual do Centro-Oeste,
Departamento de Química
Guarapuava - Paraná

Sandra Regina Masetto Antunes

Universidade Estadual de Ponta Grossa,
Departamento de Química
Ponta Grossa - Paraná

Paulo Rogério Pinto Rodrigues

Universidade Estadual do Centro-Oeste,
Departamento de Química
Guarapuava - Paraná

RESUMO: O *óxido de zinco* (ZnO) pode apresentar diferentes morfologias e assim a variação da área superficial e porosidade influenciam o processo de adsorção do poli(3-octiltiofeno) (P3OT). O objetivo do trabalho foi estudar o processo de adsorção do P3OT em filmes do óxido de zinco nas diferentes morfologias obtidas. As partículas de ZnO foram sintetizadas pelo método de precipitação. Foram realizadas imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV). Para estudo das isotermas de adsorção no equilíbrio foram utilizados os modelos de isotermas de Langmuir, Freundlich, Temkin, Elovich e Dubinin-Radushkevich (D-R). Os modelos de pseudoprimeira e pseudossegunda ordem e da difusão intrapartícula de Weber e Morris (W-M) foram utilizados para o estudo cinético do processo. O sistema ZnOM/P3OT apresentou maior capacidade de adsorção. Os sistemas apresentaram cinética de pseudoprimeira ordem, sendo que o modelo cinético de difusão intrapartícula W-M indica que os sistemas apresentaram adsorção superficial e transferência intrapartícula.

PALAVRAS-CHAVE: Energia solar; sustentabilidade; cinética.

ABSTRACT: Zinc oxide (ZnO) can have different morphologies and thus the variation of the surface area and porosity of ZnO

influence the adsorption process of poly(3-octylthiophene) P3OT. The objective of the work was to study the adsorption process of P3OT in zinc oxide films in the different morphologies obtained. The ZnO particles were synthesized by the co-precipitation method. Scanning electron microscopy (SEM) images were performed. The isotherms of Langmuir, Freundlich, Temkin, Elovich and Dubinin-Radushkevich (D-R) were used to study equilibrium adsorption isotherms. The first-order, pseudo-second order and Weber and Morris (W-M) intraparticle diffusion models were used for the kinetic study of the process. The ZnOM/P3OT system presented higher adsorption capacity. The systems presented first-order kinetics, and the kinetic model of intraparticle diffusion W-M indicates that the systems presented surface adsorption and intraparticle transfer. **KEYWORDS:** Solar energy; sustainability; kinetics.

1 | INTRODUÇÃO

Células solares híbridas são dispositivos de conversão de energia solar em energia elétrica e apresentam alto potencial de aplicação, envolvendo a interface óxido semicondutor/polímero (HASSAN, 2014). O desempenho em relação a melhores propriedades de transporte eletrônico depende da otimização de propriedades de cada uma das interfaces envolvidas na célula. As células com as melhores propriedades podem ser obtidas melhorando as propriedades dos materiais que as compõem (NAKADE, 2002).

O óxido de zinco, ZnO, apresenta alta transparência óptica na faixa do visível e boa condutividade elétrica, além de apresentar estrutura cristalina na forma hexagonal do tipo wurtzita e diferentes morfologias, o que proporcionam ao óxido propriedades distintas em termos de adsorção dos polímeros e transporte eletrônico na interface das células solares (MAYRINCK, 2014; GIANNOULI, 2012).

O poli (3-octiltiofeno) (P3OT) é um polímero orgânico formado por estruturas conjugadas, que confere propriedades condutoras e de fotoluminescência. Tem sido utilizado como material doador de elétrons nas células solares híbridas. O P3OT tem mobilidade relativamente elevada carga e comprimento da conjugação longa em comparação com outras classes de polímero (BENTO, 2013).

Na produção das células solares, o ZnO é depositado em substrato vítreo condutor (fluor tin oxide - FTO) e após a deposição, o material é imerso em solução polimérica, onde o P3OT se adsorve diretamente no óxido. Vários fatores podem influenciar no processo de adsorção em ZnO, como: a variação da área superficial e porosidade dos filmes, de acordo com as diferentes morfologias do semicondutor (GIANNOULI, 2012; SEOW, 2009).

O processo de adsorção do polímero nos filmes de óxido de zinco em diferentes morfologias pode ser estudado usando os modelos de isoterma de adsorção, elas descrevem o equilíbrio requerido para que a molécula se adsorva em determinada

superfície, descrevem a relação entre a quantidade adsorvida e a concentração da solução em contato com o adsorvente. Os modelos mais frequentemente utilizados são os de Langmuir, Freundlich e Dubinin-Radushkevich (D-R) (FIL, 2014).

Sendo assim, a principal finalidade deste trabalho foi estudar o processo de adsorção do P3OT em filmes nas diferentes morfologias obtidas na síntese do ZnO em células solares fotovoltaicas compostas pela interface ZnO/P3OT.

2 | MATERIAIS E MÉTODOS

As partículas de ZnO foram sintetizadas pelo método de co-precipitação, com a mistura de uma solução aquosa de $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ nas concentrações de: 0,05; 0,10 e 0,15 mol L⁻¹ e solução de trietanolamina (TEA) 0,1 mol L⁻¹, na temperatura de 80 °C e tempo da reação de 16 h. O pó obtido foi centrifugado na velocidade de 4500 rpm e seco em estufa a 100 °C.

Foram preparadas para cada morfologia obtida, um pasta com 3 g de ZnO, 0,1 ml de Triton X-100 (VETEC), 0,1 ml acetilacetona (VECTEC) 99,5% e 4 ml H₂O bidestilada. A deposição foi realizada sobre vidro pelo método de *spincoating* com velocidade de 3000 rpm. Após a deposição o filme foi levado a temperatura de 450 °C.

O P3OT foi cedido pelo Laboratório de Espectroscopia da Central Multiusuários da PROPPG/UDEL, as soluções poliméricas foram preparadas nas concentrações de 25 a 100 mg L⁻¹, utilizando tolueno como solvente. As medidas das concentrações foram realizadas em um espectrofotômetro UV-Vis, VIS -320G, Gehaka, em 420 nm, temperatura de 25 °C no laboratório GPEL®/UNICENTRO. O tempo de imersão dos filmes de ZnOE, ZnOM e ZnOH, foi de 24 horas.

Na Tabela 1 estão apresentadas as equações dos modelos de isotermas aplicados.

Modelo de Isoterma	Equação	Equação linear
Langmuir	$q_e = \frac{q_m K_l C_e}{1 + K_l C_e}$	$\frac{C_e}{q_e} = \frac{1}{q_m K_l} + \frac{C_e}{q_m}$
Freundlich	$q_e = K_f C_e^{1/n}$	$\ln q_e = \ln K_f + \frac{1}{n} \ln C_e$
D-R	$q_e = q_m \exp^{-k \epsilon^2}$	$\ln q_e = \ln q_m - k \left[RT \ln \left(1 + \frac{1}{C_e} \right) \right]^2$

Tabela 1. Equações dos modelos de isotermas aplicados.

K_l = constante de Langmuir (L mg⁻¹);

K_f = constante de Freundlich (mg^{1-1/n} L^{1/n} g⁻¹);

q_m = quantidade máxima de adsorção (mg g⁻¹);

n = constante indicativa da intensidade da adsorção;

$$R = 8,314 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ K}^{-1};$$

T = temperatura (K);

ε = potencial de Polianyi;

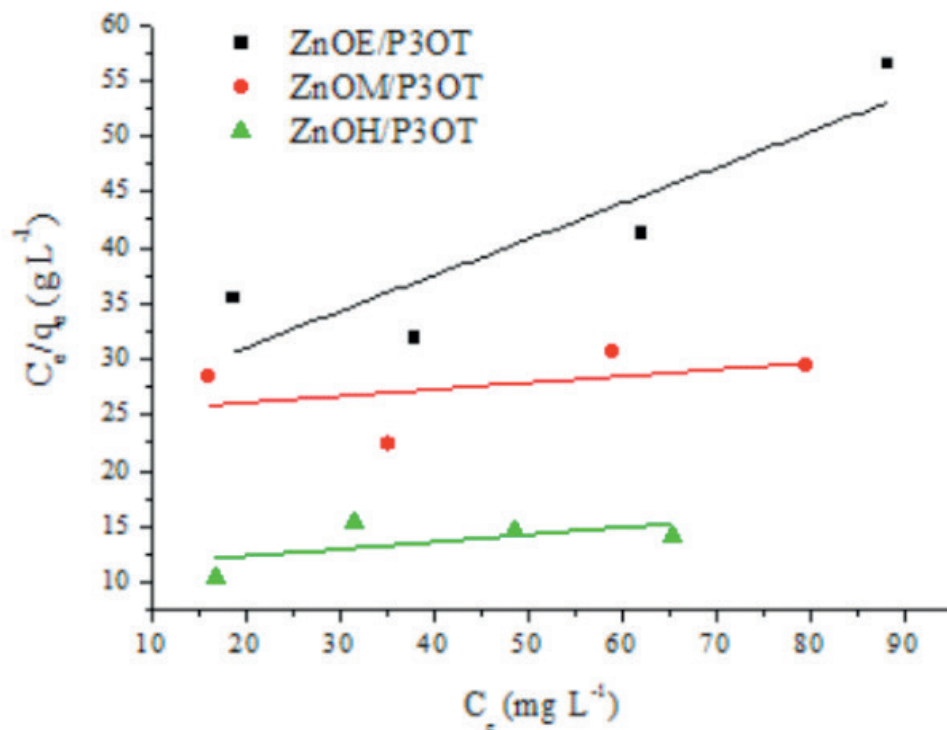
k = constante associada à energia média de adsorção E (kJ mol⁻¹).

3 | RESULTADOS E DISCUSSÃO

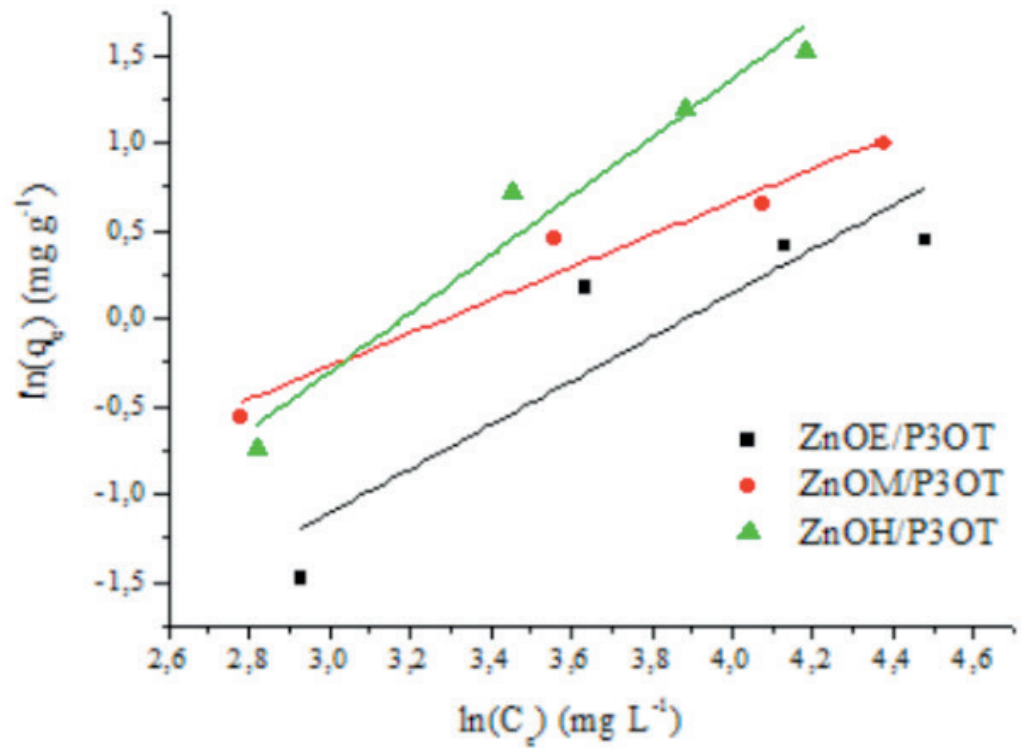
Para as três concentrações de Zn(NO₃)₂: 0,05, 0,10 e 0,15 mol L⁻¹, as morfologias obtidas na síntese foram em formato de esferas (ZnOE), sem morfologia definida (ZnOM) e de prisma-hexagonal (ZnOH) respectivamente. Essa variação das morfologias ocorre devido a concentração do precursor Zn(NO₃)₂ (AROGUZ, 2008; MINCEA, 2013). Após a deposição e temperatura de 450 °C, para eliminar os compostos orgânicos adicionados na pasta, os filmes mantiveram as morfologias de suas partículas.

Os resultados experimentais de adsorção podem ser expressos por uma isoterma de adsorção no equilíbrio podendo descrever o caráter desse processo. Para os sistemas estudados: ZnOE/P3OT, ZnOM/P3OT e ZnOH/P3OT, o melhor ajuste do modelo de isoterma no equilíbrio foi determinado pelo coeficiente de correlação linear (R²) (FIL, 2014).

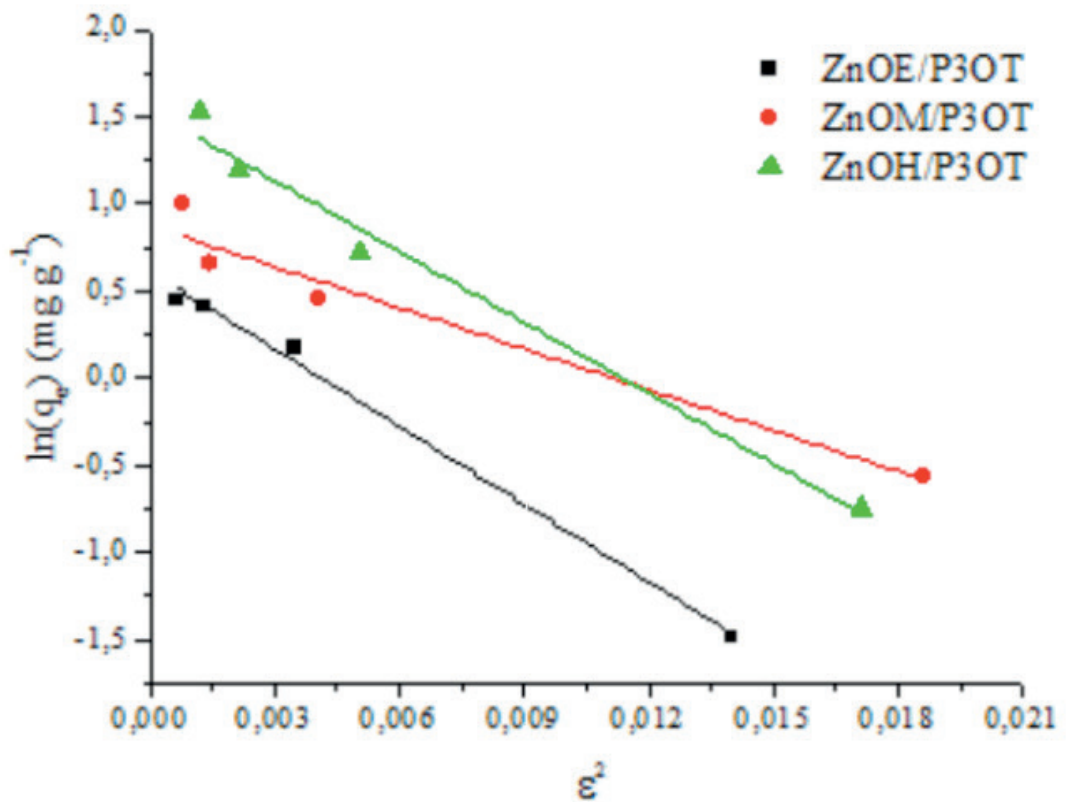
As curvas para os modelos de isoterma empregados nos sistemas: ZnOE/P3OT, ZnOM/P3OT e ZnOH/P3OT são apresentadas nas Figuras 1 A-C.



(A)



(B)



(C)

Figura 1. Ajuste dos modelos lineares de isoterma para (A) Langmuir, (B) Freundlich, (C) Dubinin-Radushkevich, para os sistemas ZnOE/P3OT, ZnOM/P3OT e ZnOE/P3OT.

Na Tabela 2, são apresentados os valores dos coeficientes de correlação e os parâmetros das Equações dos modelos utilizados para os sistemas com o P3OT.

		ZnOE/P3OT	ZnOM/P3OT	ZnOH/P3OT
Langmuir	R ²	0,815	0,667	0,737
	K _l / 10 ⁻³ (L mg ⁻¹)	13,527	9,194	15,001
	q _m (mg g ⁻¹)	3,053	6,052	1,560
Freundlich	R ²	0,914	0,960	0,999
	K _f (mg ^{1-1/n} L ^{1/n} g ⁻¹)	0,363	0,045	0,044
	n	3,001	1,070	0,902
D-R	R ²	0,995	0,958	0,969
	q _m (mg g ⁻¹)	1,834	2,392	2,578
	K _{dr} (kJ mol ⁻¹)	148,293	78,375	200,623

Tabela 2. Constantes dos modelos de isoterma para os sistemas ZnOE/P3OT, ZnOM/P3OT e ZnOH/P3OT.

Na Tabela 2, foi possível observar que os sistemas ZnOM/P3OT e ZnOH/P3OT apresentaram os maiores valores de R² para o modelo de isoterma de Freundlich, 0,960 e 0,999 respectivamente, indicando que os sistemas foram considerados não ideais, onde o ZnO apresentou superfície heterogênea e que a adsorção do P3OT foi em multicamada ocorrendo uma adsorção física favorável (MINCEA, 2013).

As K_f encontradas para o modelo nos sistemas foram K_f (ZnOM/P3OT) = 0,045 mg^{1-1/n} L^{1/n} g⁻¹ e K_f (ZnOH/P3OT) = 0,044 mg^{1-1/n} L^{1/n} g⁻¹ (Tabela 2), mostrando que ocorre uma pequena adsorção do P3OT para as duas morfologias de ZnO e os valores de n (1,070 e 0,902) indicam que o P3OT possui uma adsorção levemente favorável nos filmes de ZnOM e ZnOH (MINCEA, 2013).

O sistema ZnOE/P3OT apresentou valor de R² = 0,995 para o modelo de isoterma de Dubinin-Radushkevich. O modelo D-R é aplicado para distinguir se o processo de adsorção tem natureza física ou química. A isoterma é similar ao modelo de Langmuir, mas não assume superfície homogênea ou energia potencial constante. Na isoterma de Dubinin-Radushkevich, a constante K_{dr} está relacionada à energia média de sorção (E) através da Equação: (FÁVERE, 2010).

A energia média de sorção é a energia livre envolvida na transferência de 1 mol de soluto da solução para a superfície do adsorvente. O valor de E pode ser aplicado para determinar se a adsorção ocorre como um mecanismo de adsorção química ou física. Quando E situa-se entre 8 e 16 kJ mol⁻¹ a adsorção é um processo químico e quando E < 8 kJ mol⁻¹ esse processo é físico (MACIEL, 2013), portanto pode-se considerar que devido ao valor de E (ZnOE/P3OT) = 0,058 kJ mol⁻¹, o sistema apresentou mecanismo de adsorção física.

Os modelos cinéticos lineares são utilizados para examinar o mecanismo controlador dos processos de adsorção. Os empregados com maior frequência são os

de pseudoprimeira e pseudossegunda ordem. Quando o mecanismo do processo de adsorção definitivo não pode ser obtido por esses dois modelos, o modelo da difusão intrapartícula de Weber e Morris pode ser empregado (SAMADI, 2015).

A curva do modelo de difusão intrapartícula para o P3OT está apresentada na Figura 2.

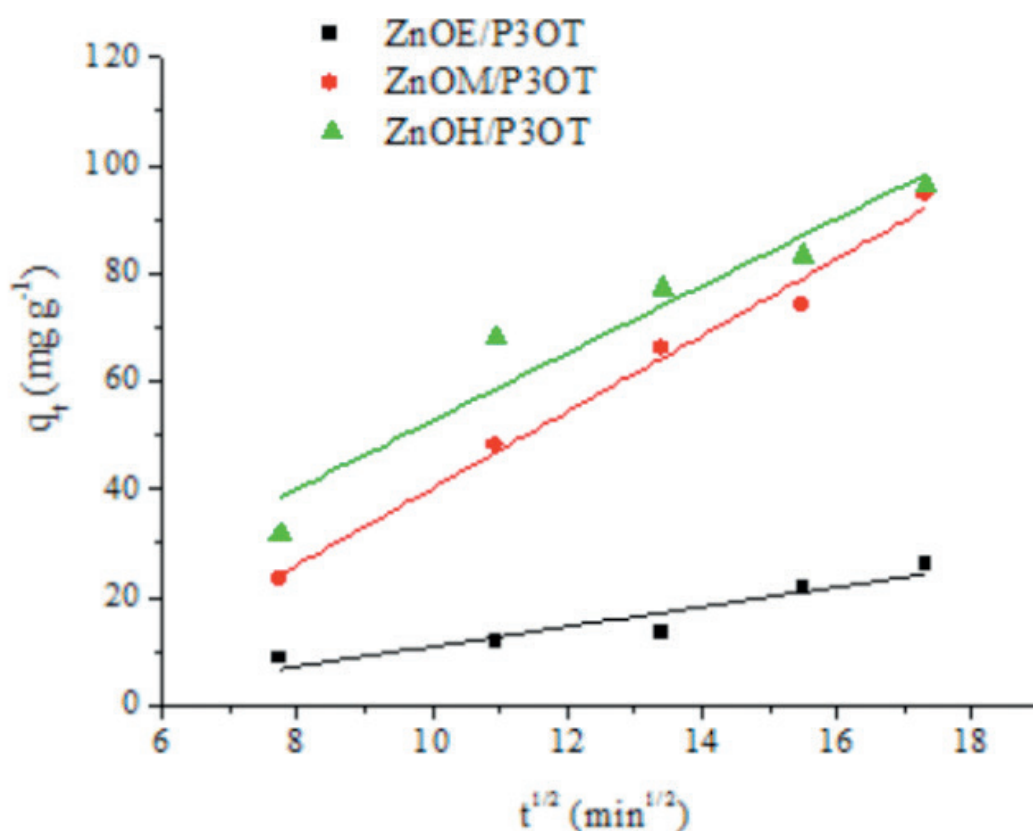


Figura 2. Modelo cinético de difusão intrapartícula da adsorção de P3OT nas morfologias: esférica (ZnOE), sem morfologia (ZnOM) e prisma-hexagonal (ZnOH).

O modelo cinético de difusão intrapartícula W-M apresentou a melhor correlação dos dados experimentais, com valores de $R^2 = 0,935$; $0,987$ e $0,930$ para os sistemas ZnOE/P3OT, ZnOM/P3OT e ZnOH/P3OT respectivamente, indicando que o P3OT foi conduzido da solução para o ZnO através do transporte intrapartícula (NASCIMENTO, 2014).

Na Tabela 2 estão apresentados os parâmetros cinéticos para o modelo W-M.

		ZnOE/P3OT	ZnOM/P3OT	ZnOH/P3OT
	R^2	0,935	0,987	0,930
Difusão intrapartícula W-M	k_d ($\text{mg g}^{-1} \text{min}^{-0.5}$)	1,830	7,090	6,250
	C (mg g^{-1})	7,410	30,81	9,938

Tabela 2. Parâmetros cinéticos do processo de adsorção de P3OT nas morfologias: esférica (ZnOE), sem morfologia (ZnOM) e prisma-hexagonal (ZnOH).

O modelo W-M apresentou valores de $k_d = 1,830; 7,090$ e $6,250 \text{ mg g}^{-1} \text{ min}^{-0,5}$ para os sistemas ZnOE/P3OT, ZnOM/P3OT e ZnOH/P3OT respectivamente, apresentando um maior valor para ZnOM/P3OT, mostrando um aumento na difusão nesse sistema comparado com os outros. Os valores de $C_{(ZnOE/P3OT)} = 7,410 \text{ mg g}^{-1}$; $C_{(ZnOM/P3OT)} = 30,81 \text{ mg g}^{-1}$ e $C_{(ZnOH/P3OT)} = 9,938 \text{ mg g}^{-1}$ foram diferentes de zero, mostrando que as retas q_t versus $t^{1/2}$ não passaram pela origem para os três sistemas em estudo (Figura 2). Assim foi possível observar que ocorreu um mecanismo complexo de adsorção superficial e transferência intrapartícula difusional e no processo de transferência de massa, outros mecanismos devem atuar simultaneamente no controle do processo de adsorção (NASCIMENTO, 2014).

4 | CONCLUSÕES

Para os 3 sistemas: ZnOE/P3OT, ZnOM/P3OT e ZnOE/P3OT foi possível verificar que a superfície do ZnO foi heterogênea, a adsorção do P3OT em multicamadas e o mecanismo de adsorção físico.

No estudo cinético da adsorção, os sistemas apresentaram cinética de difusão intrapartícula W-M, onde o P3OT foi conduzido da solução para o ZnO através da adsorção superficial e transferência intrapartícula difusional.

A capacidade de adsorção do P3OT no ZnO com morfologia não definida pode acarretar em uma melhora nas propriedades da interface da célula solar.

REFERÊNCIAS

- AROGUZ, J. GULEN, R. H. EVERS, **Adsorption of methylene blue from aqueous solution on pyrolyzed petrified sediment**. *Bioresour. Technol.*, v. 99, p. 1503, 2008.
- BENTO; E. C. R. MAIA, P. R. P. RODRIGUES; G. J. MOORE; G. LOUARN; H. SANTANA, **Poly (3-Alkylthiophenes) and Polydiphenylamine Copolymers: A Comparative Study Using Electrochemical Impedance Spectroscopy**, *Journal of Materials Science: Materials In Electronics*, v. 12, p. 4732-4738, 2013.
- FÁVERE, V. T.; RIELLA, H. G.; ROSA, S., **Cloreto de n-(2-hidroxil) propil-3-trimetil amônio quitosana como adsorvente de corantes reativos em solução aquosa**, *Química Nova*, v. 33, n. 7, p. 1476-1481, 2010.
- FIL; M. T. YILMAZ; S. BAYAR; M. T. ELKOCA, **Investigation of adsorption of the dyestuff astrazon red violet 3rn (basic violet 16) on montmorillonite clay**, *Brazilian Journal of chemical Engineering*, v. 31, p. 171-182, 2014.
- GIANNOULI; F. SPILIOPOULOU; **Effects of the morphology of nanostructured ZnO films on the efficiency of dye-sensitized solar cells**, *Renewable Energy*, v. 41, p. 115- 122, 2012.
- HASSAN; M. R. HASHIM; Y. AL-DOURI, **Morphology and optical investigations of ZnO pyramids and nanoflakes for optoelectronic applications**, *Optic – International Journal For Light And Electron Optics*, v. 125, n. 11, p. 2560-2564, 2014.

MACIEL, G. M.; SOUZA, C. G. M.; ARAUJO, C. A. V.; BONA, E.; HAMINIUK, C. W. I.; CASTOLDI, R.; BRACHT, A.; PERALTA, R. M. **Biosorption of herbicide picloram from aqueous solutions by live and heat-treated biomasses of *Ganoderma lucidum* (Curtis) P. Karst and *Trametes* sp.** Chemical Engineering Journal, v. 215–216, p. 331–338, 2013.

MAYRINCK; E. RAPHAEL; J. L. FERRARI; M. A. SCHIAVON; **Síntese, propriedades e aplicações de óxido de zinco nanoestruturado**; Revista Virtual De Química, v. 6, p. 1185-1204, 2014.

MINCEA, V. PATRULEA, A. NEGRULESCU, R. SZABO, V. OSTAFE, **Adsorption of three commercial dyes onto chitosan beads using spectrophotometric determination and a multivariate calibration method**, Journal of Water Resource and Protection, v. 5, p. 446-457, 2013.

NAKADE, M. MATSUDA, S. KAMBE, Y. SAITO, T. KITAMURA, T. SAKATA, Y. WADA, H. MORI, S. YANAGIDA, **Dependence Of TiO_2 nanoparticle preparation methods and annealing temperature on the efficiency of dye-sensitized solar cells**, Journal of Physics Chemistry. B. v. 106, p. 10004–10010, 2002.

NASCIMENTO, A. C. A. LIMA, C. B. VIDAL, D. Q. MELO, G. S. C. RAULINO, **Adsorção: aspectos teóricos e aplicações ambientais**, Fortaleza: Imprensa Universitária, 2014, 256 p.

SAMADI, R. HASANZADEH; **Adsorption isotherms, kinetic and desorption on removal os toxic metal ions from aqueous solutions by polymeric adsorbent**, Journal of applied polymer science, v. 132, n. 11, p. 41642-41655, 2015.

SEOW, A. S. WONG, V. THAVASI, R. JOSE, S. RAMAKRISHNA, G. W. HO, **Controlled synthesis and application of ZnO nanoparticles, nanorods and nanospheres in dye-sensitized solar cells**, Nanotechnology, v. 20, p. 45604, 2009.

SOBRE A ORGANIZADORA:

Marcia Regina Werner Schneider Abdala: Mestre em Engenharia de Materiais pela Universidade Federal do Rio de Janeiro, Graduada em Engenharia de Materiais pela Universidade Federal do Rio de Janeiro. Possui experiência na área de Educação a mais de 06 anos, atuando na área de gestão acadêmica como coordenadora de curso de Engenharia e Tecnologia. Das diferentes atividades desenvolvidas destaca-se a atuação como professora de ensino superior atuando em várias áreas de graduações; professora de pós-graduação *lato sensu*; avaliadora de artigos e projetos; revisora de revistas científicas; membro de bancas examinadoras de trabalhos de conclusão de cursos de graduação. Atuou como inspetora de Aviação Civil, nas áreas de infraestrutura aeroportuária e segurança operacional em uma instituição federal.

Agência Brasileira do ISBN
ISBN 978-85-85107-64-2

