

ADSORÇÃO COMPETITIVA DE As (V) E Hg (II) EM GOETHITA: COMPARAÇÃO ENTRE RESULTADOS EXPERIMENTAIS E MODELAGEM NO VISUAL MINTEQ

Isabelle S. M. Costa*, Isabela C. F. Vasques, Ludmila F. Gonçalves, Igor R. de Assis, Jaime W. V. de Mello, Daniel K. R. Cardoso

ODS6
Pesquisa

Introdução

A contaminação de recursos hídricos por Arsênio (As(V)) e Mercúrio (Hg(II)) representa uma séria ameaça ambiental, particularmente em regiões de atividade mineira. Estes contaminantes coexistem no ambiente e interagem com minerais como a Goethita ($\alpha\text{-FeOOH}$) – um oxihidróxido de ferro reconhecido por sua notável capacidade de adsorção. Compreender a adsorção competitiva entre As(V) e Hg(II) neste mineral é essencial para prever o comportamento destes poluentes. Este trabalho compara dados experimentais com simulações realizadas no software Visual MINTEQ, avaliando a eficácia do modelo em reproduzir essas interações complexas.

Objetivos

- Comparar a adsorção competitiva de As(V) e Hg(II) em goethita por meio de experimentos e modelagem no Visual MINTEQ.
- Avaliar a influência da concentração de Hg(II) na adsorção de As(V).
- Verificar a capacidade preditiva do modelo em simular interações competitivas.

Material e Métodos ou Metodologia

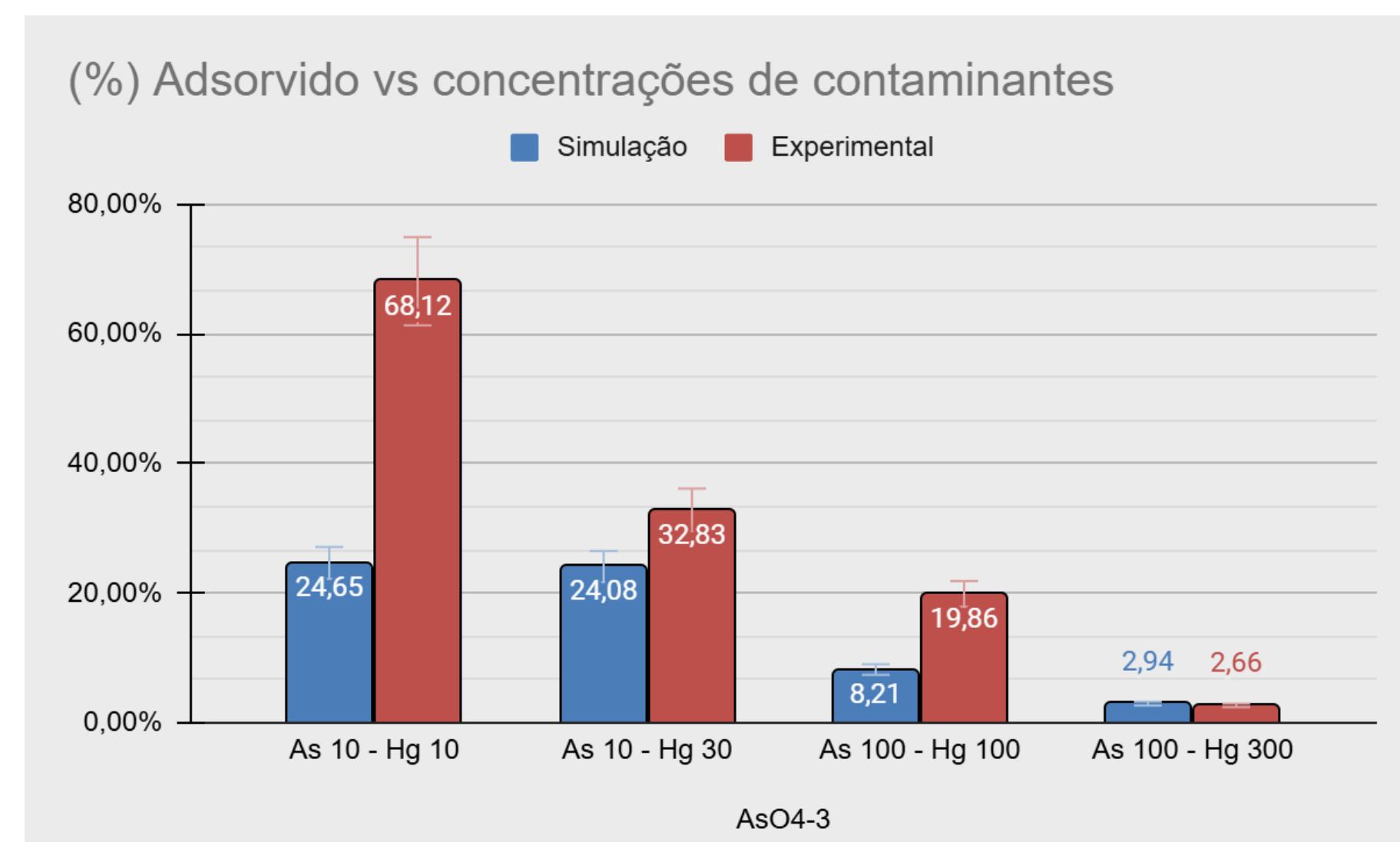
• Experimental:



- Simulação:** Modelagem no Visual MINTEQ com as mesmas condições experimentais, utilizando o banco de dados do software para goethita.

Resultados e/ou Ações Desenvolvidas

- A adsorção de As(V) diminui com o aumento da concentração de Hg(II).
- O Visual MINTEQ capturou a tendência geral, mas subestimou a competição nos tratamentos com baixas concentrações.
- Boa correlação entre modelo e experimento no tratamento com maiores concentrações (100 mg/L As e 300 mg/L Hg).



Conclusões

- O Hg(II) parece competir com o As(V) pelos sítios de adsorção na goethita.
- O Visual MINTEQ mostrou-se útil, mas necessita de ajustes para simular interações competitivas em todas as condições.
- A validação experimental é essencial para melhorar a confiabilidade do modelo.

Bibliografia

- BONNISSEL-GISSLINGER, Pascale et al. Modeling the adsorption of mercury (II) on (hydr) oxides II: $\alpha\text{-FeOOH}$ (goethite) and amorphous silica. Journal of Colloid and Interface Science, v. 215, n. 2, p. 313-322, 1999.
- CARDOSO, Daniel Kroehling Rodrigues. Sorption and stability of trace elements on aluminum-substituted iron oxides. 2023.
- CORNELL, R.M.; SCHWERTMANN, U. The iron oxides: structure, properties, reactions, occurrence, and uses. Weinheim: Wiley VCH, 2003. 664p

Apoio Financeiro