

## Resumo

Estuda-se a adsorção multicomponente de compostos orgânicos, concretamente fenol, p-nitrofenol e m-cresol, partindo de soluções aquosas diluídas destes compostos, na resina macrorreticular Duolite ES-861.

Fez-se o estudo experimental do equilíbrio monocomponente às temperaturas de 20, 40 e 60°C, e concentrações até 2g/l. Diversos modelos de isotérmicas foram testados, verificando-se que o modelo de Jossens e a Teoria da Solução Adorvida Ideal em Superfícies Energeticamente Heterogéneas (HIAST), com uma distribuição binomial das energias de adsorção e o equilíbrio local descrito pela equação de Langmuir, apresentam os melhores ajustes.

Fez-se o estudo experimental do equilíbrio multicomponente, para três sistemas binários e um ternário, e os resultados são comparados com as previsões obtidas com duas teorias diferentes, a IAST - Teoria da Solução Adorvida Ideal, usando a equação de Jossens para representar o equilíbrio monocomponente e a HIAST. As duas teorias prevêm razoavelmente bem o equilíbrio.

Foram realizadas experiências de saturação em adsorvedor contínuo agitado, usando soluções mono-soluto de fenol, p-nitrofenol e m-cresol, às temperaturas de 20, 40 e 60°C, para estudar os mecanismos de difusão intraparticular. As histórias de concentração experimentais foi ajustado o modelo "Difusão nos Poros" e obtida, como parâmetro, a difusividade efectiva nos poros de cada componente. Verifica-se que, o modelo representa bem as histórias da concentração experimentais, mas não descreve correctamente os mecanismos de transferência de massa no interior das partículas, pois os valores das difusividades efectivas nos poros sugerem a hipótese da existência de difusão à superfície em paralelo com a difusão nos poros.

Para adsorvedor agitado contínuo, é feito o estudo da influência da resistência à transferência de massa no filme em volta das partículas e das difusividades cruzadas na adsorção multicomponente, usando o modelo "Difusão nos Poros".

Foram efectuados ensaios de saturação multicomponente com três sistemas binários e um ternário, em adsorvedor contínuo agitado. Estas experiências multicomponente foram simuladas com o modelo "Difusão nos Poros", com o equilíbrio previsto pela HIAST, considerando válida a hipótese das difusividades cruzadas serem nulas e tomando para as difusividades directas os valores das difusividades efectivas monocomponente. O modelo descreve bem os resultados experimentais.

Para estudar a adsorção em leito fixo foram feitos três ensaios com os sistemas binários e um com o ternário a 20°C. Estes ensaios foram simulados com um modelo que considera: o escoamento no leito do tipo "Pistão Difusional"; a resistência externa à transferência de massa no filme; a resistência interna nas partículas descrita pelo modelo "Difusão nos Poros" e o equilíbrio previsto pela HIAST. As simulações obtidas podem considerar-se razoavelmente boas dado todos os parâmetros do modelo terem sido obtidos de forma independente. Os desvios verificados em algumas situações são consequência do equilíbrio pelo que é fundamental uma muito boa previsão deste.

Foi ainda testado o modelo "Frente de Reacção" simulando dois ensaios de regeneração monocomponente efectuados em adsorvedor perfeitamente agitado em que os solutos em questão foram o p-nitrofenol e o m-cresol e o regenerante NaOH IM. O comportamento do modelo é bom.

## **Abstract**

Multi-solute adsorption of phenol, p-nitrophenol and m-cresol from dilute aqueous solutions on the macroporous resin Duolite ES861 is studied.

Single-component equilibrium data at 20, 40 and 60°C was determined with solute concentrations from 0 to 2 g/l. Several isotherms were tested and both Jossens equation and Heterogeneous Ideal Adsorbed Solution Theory (HIAST) with a binomial distribution of the adsorption energies and the Langmuir equation as the local adsorption isotherm fit the experimental data well.

Experimental multi-solute equilibrium data, for three bi-solute systems and for a ternary system, was determined. The results are compared with the predictions from Ideal Adsorbed Solution Theory (IAST) and HIAST and both theories give fairly good predictions.

Several saturation experiments were done in a continuous stirred adsorber to study the intraparticle diffusion mechanisms. The Pore Diffusion Model is fitted to the single - solute experimental results and the effective pore diffusivities are found as a model parameter. The Pore Diffusion Model fits well the concentration histories but does not describe correctly the mass transfer mechanisms within the particles; the numerical values of the effective pore diffusivities suggest that there is surface diffusion in parallel with pore diffusion.

The influence of the external fluid film resistance and of the cross-term Fickian diffusivities in multi-solute adsorption was studied for a CSTR with the Pore Diffusion Model.

Several saturation CSTR experiments were done with binary and ternary systems and the results simulated with the Pore Diffusion Model, considering the equilibrium predicted by HIAST, null cross-term Fickian diffusivities and main-term Fickian diffusivities equal to single-component diffusivities. The concentration histories are well predicted.

Three binary and one ternary fixed-bed saturation runs (breakthrough curves) were done and the experimental curves compared with the simulations obtained using a model that includes intraparticle pore diffusion, external fluid film resistance, axial dispersion and the equilibrium predicted by HIAST. The model, with all parameters obtained in an independent way, predicts rather well the experimental breakthrough curves. Some deviations occur due to equilibrium, which demonstrate the importance of equilibrium prediction.

Two mono-solute regeneration CSTR experiments were modeled by the Reaction Front Model. The solutes are p-nitrophenol and m-cresol and the regenerant Na OH IM. The model represents well the experimental results.