



DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS CINÉTICOS DA DEGRADAÇÃO DO ÁCIDO SALICÍLICO EM SISTEMA UVC/H₂O₂ PELO MÉTODO INTEGRAL

Wesley Thölken¹; Rodrigo Geremias¹; Evandro Balestrin¹

¹Universidade do Oeste de Santa Catarina (UNOESC), Videira, Santa Catarina, Brasil.
wesleytholken@outlook.com.

Palavras-Chave: cinética química; ácido salicílico; poluentes emergentes.

Introdução

A contaminação de corpos hídricos por compostos orgânicos recalcitrantes tem se intensificado devido à crescente presença de substâncias com elevada estabilidade química e baixa biodegradabilidade. Esses contaminantes apresentam elevada persistência ambiental, dificultando sua remoção por processos convencionais de tratamento de água e efluentes e favorecendo sua acumulação em ambientes aquáticos (Schleger; Andrade, 2023).

Entre esses compostos destacam-se os desreguladores endócrinos, associados a alterações reprodutivas, imunológicas e no desenvolvimento de organismos aquáticos. Conforme Pessoa *et al.* (2012), a exposição contínua a essas substâncias compromete diferentes processos fisiológicos em espécies aquáticas. Em humanos, evidências indicam correlação com neoplasias hormônio-dependentes e redução da contagem de espermatozoides (Queiroz *et al.*, 2012). Além disso, processos convencionais de tratamento, como coagulação, floculação, adsorção em carvão ativado e desinfecção, apresentam eficiência limitada para a remoção desses micropoluentes (Riva *et al.*, 2018).

Nesse contexto, os Processos Oxidativos Avançados (POAs) constituem uma alternativa promissora por promoverem a geração de espécies altamente reativas, principalmente radicais hidroxila ($\bullet\text{OH}$), capazes de degradar compostos orgânicos recalcitrantes e promover sua mineralização parcial ou completa. Conforme Nascimento *et al.* (2017), esses processos apresentam elevada eficiência na degradação de contaminantes orgânicos persistentes.

O ácido salicílico (AS) é amplamente empregado como composto modelo em estudos de fotodegradação devido ao seu comportamento reacional bem conhecido e à sua relevância ambiental. Sua ocorrência em águas naturais e efluentes tratados, em concentrações entre 286,7 e 2.178,2 ng L⁻¹, justifica sua utilização em estudos cinéticos (Verenitch; Lowe; Mazumder, 2006).

A eficiência dos Processos Oxidativos Avançados depende do comportamento cinético das reações. Nesse contexto, Atkins e Paula (2018) destacam que a velocidade reacional é influenciada pela concentração dos reagentes, temperatura e mecanismo da reação, evidenciando a importância da determinação dos parâmetros cinéticos.

A cinética química estuda a velocidade das reações, os fatores que a influenciam e seus mecanismos. Segundo Fogler (2022), a taxa de reação corresponde à variação da concentração ao longo do tempo e é descrita por leis de velocidade que relacionam a velocidade reacional à constante cinética (k) e à ordem de reação (n). Como a forma da lei de

velocidade normalmente não é conhecida previamente, esses parâmetros devem ser determinados experimentalmente.

Entre os métodos empregados destacam-se as abordagens integral e diferencial. O mesmo autor comenta que o método integral consiste na integração da lei de velocidade após assumir uma ordem de reação, cuja validade é posteriormente verificada pela linearidade dos dados experimentais. Assim, diferentes modelos cinéticos podem ser avaliados até a obtenção do melhor ajuste, permitindo estimar simultaneamente a ordem da reação e a constante cinética.

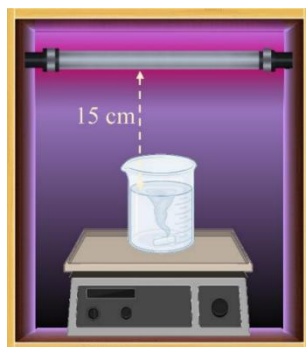
No presente estudo, emprega-se o método integral para determinar os parâmetros cinéticos da degradação do ácido salicílico em sistema homogêneo UVC/H₂O₂. Essa abordagem apresenta vantagens como simplicidade de aplicação, menor sensibilidade às flutuações experimentais e facilidade de interpretação gráfica, sendo amplamente utilizada na modelagem cinética de sistemas reacionais.

Dessa forma, este trabalho tem como objetivo determinar os parâmetros cinéticos da degradação do ácido salicílico em sistema UVC/H₂O₂ por meio do método integral, contribuindo para a compreensão do comportamento cinético do processo oxidativo e fornecendo subsídios para a otimização de sistemas baseados em Processos Oxidativos Avançados.

Material e Métodos

Os experimentos foram realizados em uma câmara fotoreacional hermeticamente fechada, equipada com lâmpada UVC, béquer de 300 ml e agitador magnético. O interior da câmara foi revestido com papel-alumínio para maximizar a reflexão da radiação, mantendo-se distância de 15 cm entre a lâmpada e a solução, ilustrado pela Figura 1.

Figura 1 - Unidade fotoreacional utilizada nos experimentos.



Fonte: Giovanazzi *et al.* (2024)

A solução reacional foi preparada em balão volumétrico de 250 ml, contendo 15 mg L⁻¹ de ácido salicílico e 75 mg L⁻¹ de H₂O₂, obtida a partir de solução estoque de ácido salicílico (150 mg L⁻¹) e peróxido de hidrogênio a 35%, completando-se o volume com água ultrapura.

Após homogeneização por agitação magnética, foi retirada uma alíquota de 3 ml para determinação da absorbância inicial em espectrofotômetro UV-Vis, utilizando comprimento de onda de 292 nm. Em seguida, a solução foi submetida à irradiação UVC, iniciando-se a contagem do tempo após o fechamento da câmara.



Foram coletadas alíquotas de 3 ml a cada 15 min durante 120 min, totalizando nove pontos experimentais. As concentrações de ácido salicílico foram determinadas por curva de calibração construída a partir de soluções padrão entre 0 e 25 mg L⁻¹.

Os parâmetros cinéticos foram determinados pelo método integral, mediante ajuste dos modelos integrados de ordem zero, primeira, segunda e terceira aos dados experimentais de concentração em função do tempo. A ordem de reação foi definida pelo modelo que apresentou o maior coeficiente de determinação (R²), sendo a constante de velocidade obtida a partir da inclinação da reta correspondente.

Resultados e Discussão

Os resultados da calibração espectrofotométrica são apresentados na Tabela 1, que reúne os valores de concentração e absorvância do ácido salicílico utilizados na construção da curva de calibração.

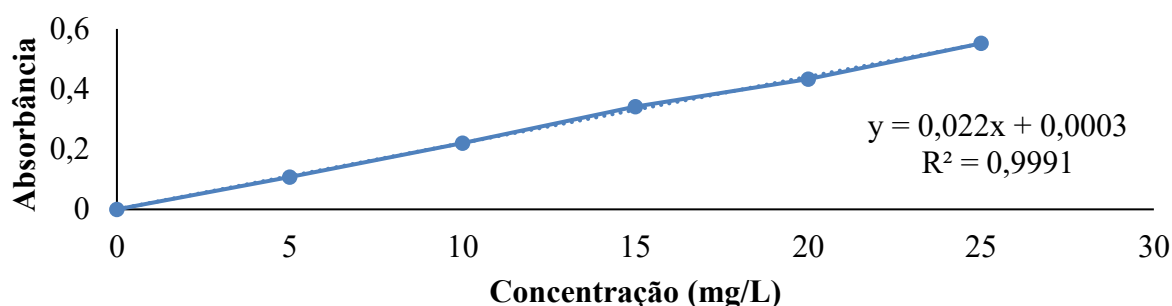
Tabela 1 - Dados da curva de calibração do ácido salicílico

Concentração (mg L ⁻¹)	Absorvância
0	0
5	0,108
10	0,220
15	0,342
20	0,433
25	0,552

Fonte: elaborado pelo próprio autor (2026)

Os dados apresentados na Tabela 1 demonstram o aumento progressivo da absorvância com o incremento da concentração de ácido salicílico, indicando comportamento compatível com a resposta esperada para análises espectrofotométricas. A partir desses resultados, foi construída a curva de calibração apresentada no Gráfico 1.

Gráfico 1 - Curva de calibração do ácido salicílico



Fonte: elaborado pelo próprio autor (2026)

A relação linear observada demonstra comportamento compatível com a Lei de Beer-Lambert no intervalo de concentrações estudado, evidenciando a proporcionalidade entre concentração e absorvância.



Dos nove pontos experimentais obtidos durante o monitoramento da degradação do ácido salicílico, foram selecionados para a análise cinética apenas aqueles correspondentes ao intervalo entre 0 e 45 min. Essa escolha foi baseada no fato de que, nesse período inicial, foi observada a maior redução da concentração do composto, caracterizando a etapa de maior velocidade de degradação da reação.

A partir de 45 min de tratamento, observou-se uma redução gradual na variação da concentração de ácido salicílico, indicando uma diminuição progressiva da taxa de reação. Após 60 min, a concentração apresentou tendência à estabilização, evidenciando que o processo de degradação passou a ocorrer de forma significativamente mais lenta. Esse comportamento pode estar associado ao consumo parcial do peróxido de hidrogênio, reduzindo a geração de espécies oxidantes, como os radicais hidroxila ($\bullet\text{OH}$), responsáveis pela degradação do contaminante.

Além disso, a menor concentração do composto ao longo do tempo pode ter limitado a frequência de colisões entre o poluente e as espécies reativas disponíveis, contribuindo para a redução da velocidade global do processo. Dessa forma, embora a estabilização tenha sido observada após 60 min, os cálculos cinéticos e o ajuste dos modelos foram realizados utilizando apenas os dados experimentais até 45 min, por representarem a região de maior velocidade de degradação e maior variação de concentração, conforme apresentado na Tabela 2.

Tabela 2 - Concentração e absorbância do ácido salicílico ao longo do tempo

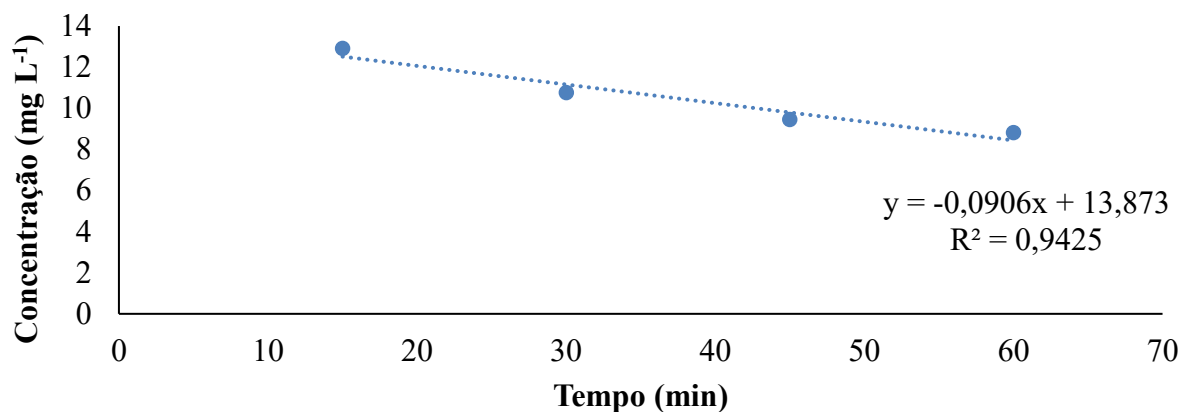
Tempo (min)	Concentração (mg L^{-1})	Absorbância
0	16,5773	0,365
15	12,8955	0,284
30	10,7591	0,237
45	9,4409	0,208
60	8,8045	0,194
75	8,6227	0,190
90	8,6227	0,190
105	8,6227	0,190
120	8,6227	0,190

Fonte: elaborado pelo próprio autor (2026)

Conforme apresentado na Tabela 2, observa-se a redução progressiva da concentração de ácido salicílico ao longo do tempo de irradiação, acompanhada pela diminuição da absorbância. Esse comportamento evidencia a degradação do composto durante o processo oxidativo.

Os ajustes lineares dos modelos cinéticos de ordem zero, primeira e segunda são apresentados nos Gráficos 2, 3 e 4, permitindo comparar a adequação de cada modelo aos dados experimentais.

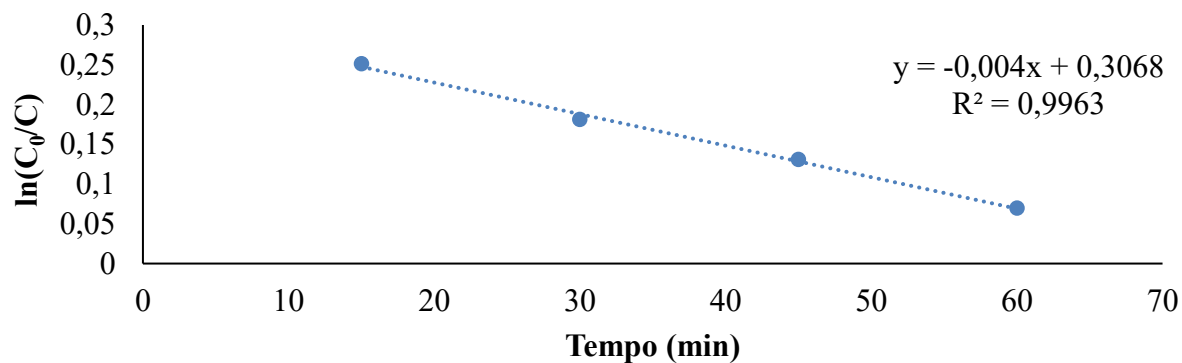
Gráfico 2 - Modelo cinético de ordem zero



Fonte: elaborado pelo próprio autor (2026)

O ajuste linear de ordem zero apresentou R^2 igual a 0,9425, indicando elevada capacidade de representação da variação da concentração ao longo do tempo. Em seguida, avaliou-se o modelo de primeira ordem, conforme apresentado no Gráfico 3.

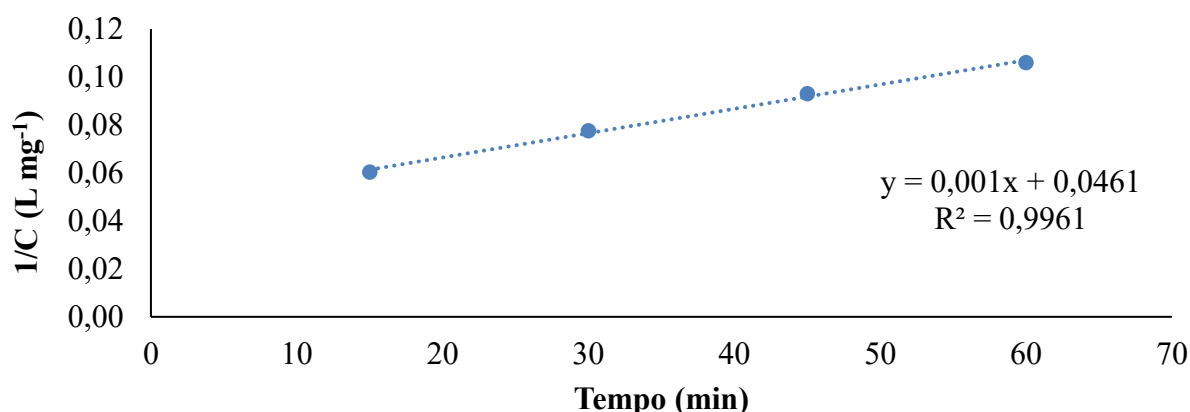
Gráfico 3 - Modelo cinético de primeira ordem



Fonte: elaborado pelo próprio autor (2026)

O modelo de primeira ordem apresentou um R^2 igual a 0,9963, o maior entre todos os modelos cinéticos avaliados, evidenciando a melhor concordância com o comportamento experimental. Posteriormente, foi avaliada a cinética de segunda ordem, apresentada no Gráfico 4.

Gráfico 4 - Modelo cinético de segunda ordem



Fonte: elaborado pelo próprio autor (2026)

O ajuste de segunda ordem apresentou R^2 igual a 0,9961, o segundo maior valor entre os modelos cinéticos avaliados, superando o modelo de ordem zero.

Os parâmetros cinéticos obtidos para os modelos de ordem zero, primeira ordem e segunda ordem são apresentados na Tabela 3, permitindo a comparação dos valores de R^2 e das constantes de velocidade determinadas para cada ajuste.

Tabela 3 - Comparação dos modelos cinéticos aplicados à degradação do ácido salicílico

Ordem (n)	R^2	Constante de Velocidade (k)
0	0,9425	0,0906
1	0,9963	0,004
2	0,9961	0,001

Fonte: elaborado pelo próprio autor (2026)

A avaliação dos modelos cinéticos para a etapa final da degradação do ácido salicílico demonstrou que os modelos de primeira e segunda ordem apresentaram coeficientes de determinação superiores ao modelo de ordem zero, indicando melhor ajuste aos dados experimentais. Entre eles, o modelo de primeira ordem apresentou o maior coeficiente de determinação, embora a diferença em relação ao de segunda ordem tenha sido pequena, sendo, portanto, considerado o mais adequado para descrever o processo nas condições experimentais estudadas.

A constante de velocidade foi obtida a partir do coeficiente angular da reta resultante da linearização da equação integrada de primeira ordem, correspondendo a $k = 4,0 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}$. Esse resultado indica que, na etapa final da reação, a degradação do ácido salicílico pode ser descrita por um modelo de pseudo-primeira ordem, sugerindo que a velocidade do processo é predominantemente dependente da concentração do contaminante, assumindo-se disponibilidade efetiva das espécies oxidantes geradas pelo sistema UVC/H₂O₂.



Em comparação com a literatura, Gackowska, Studziński e Shyichuk (2025) observaram comportamento de pseudo-primeira ordem para a foto-oxidação do ácido salicílico em sistemas UV/H₂O₂, com constantes de velocidade entre 0,0052 min⁻¹, na ausência de H₂O₂, e 0,0512 min⁻¹ para 8,8 mM de peróxido de hidrogênio, sendo 0,0295 min⁻¹ para 1,8 mM. No presente estudo, a constante aparente foi de 0,004 min⁻¹, inferior ao valor reportado pelos autores, apesar da concentração de H₂O₂ utilizada (2,2 mM) ser semelhante. Essa diferença pode ser atribuída às condições operacionais empregadas, como intensidade da radiação UVC, geometria do fotorreator, distribuição da irradiância e demais fatores que influenciam a formação de radicais hidroxila e, consequentemente, a velocidade da reação.

Conclusões

Os resultados obtidos permitiram caracterizar a cinética de degradação do ácido salicílico no sistema homogêneo H₂O₂/UVC por meio do método integral. A curva de calibração espectrofotométrica apresentou comportamento linear entre concentração e absorbância, assegurando confiabilidade na determinação das concentrações ao longo do processo oxidativo. O monitoramento da reação evidenciou redução progressiva da concentração do composto, confirmando a ocorrência da degradação durante o tratamento.

A avaliação dos modelos cinéticos integrados de ordem zero, primeira ordem e segunda ordem demonstrou diferenças na capacidade de representação do comportamento experimental. Os modelos de primeira e segunda ordem apresentaram coeficientes de determinação superiores ao modelo de ordem zero, indicando melhor concordância com os dados experimentais. Entre os modelos avaliados, a cinética de primeira ordem apresentou o maior coeficiente de determinação (R²) no valor de 0,9963, sendo considerada a mais adequada para descrever a degradação do ácido salicílico nas condições estudadas. A constante de velocidade obtida a partir da linearização da equação integrada foi de $k = 4,0 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}$.

Os resultados obtidos demonstram o potencial do sistema H₂O₂/UVC para a degradação de ácido salicílico em meio aquoso e fornecem parâmetros cinéticos relevantes para a modelagem, o dimensionamento e a otimização de processos oxidativos avançados voltados ao tratamento de efluentes contendo contaminantes orgânicos.

Agradecimentos

Os autores agradecem à UNOESC e ao curso de Engenharia Química, aos professores e colaboradores pelo suporte, conhecimento compartilhado e contribuição para o desenvolvimento deste trabalho.

Referências

ATKINS, Peter; DE PAULA, Julio. **Físico-química: fundamentos**. 6. ed. Rio de Janeiro, RJ: LTC, 2018.

FOGLER, Homer Scott. **Elementos de Engenharia das Reações Químicas**. 6. ed. Rio de Janeiro, RJ: LTC, 2022.



GACKOWSKA A.; STUDZIŃSKI W.; SHYICHUK A. Intermediates of Hydrogen Peroxide-Assisted Photooxidation of Salicylic Acid: Their Degradation Rates and Ecotoxicological Assessment. **International Journal of Molecular Sciences**. [S.I.], v. 26, n. 2, 697, jan. 2025. <https://doi.org/10.3390/ijms26020697>.

GIOVANAZZI, L. C.; MISSNER, M. E. P.; FRANCISCO, I. B. M.; RODRIGUES, N. M. M.; SILVA JÚNIOR, A. H. da; PELLENZ, L.; AGUIAR, C. R. L. de; OLIVEIRA, C. R. S. de. Photocatalytic Degradation Using TiO₂ P25: a comparative study for different textile dyes. **Brazilian Journal of Animal and Environmental Research**, [S.I.], v. 7, n. 1, p. 125-144, jan. 2024. <http://dx.doi.org/10.34188/bjaerv7n1-011>.

NASCIMENTO, R. F. do; ABDALA NETO, E. F.; RIBEIRO, J. P.; OLIVEIRA, A. G. de; BARROS, A. L.; BARROS, F. C. de F. (org.). **Processos oxidativos avançados: fundamentos e aplicações em matrizes ambientais**. Fortaleza, CE: Imprensa Universitária, 2017. Disponível em: https://repositorio.ufc.br/bitstream/riufc/32127/1/2017_liv_rfnascimento.pdf. Acesso em: 01 maio 2026.

PESSOA, G. de P.; SANTOS, A. B. dos; SOUZA, N. C. de; ALVES, J. A. C.; NASCIMENTO, R. F. do. Desenvolvimento de metodologia para avaliar remoção de estrogênios em estações de tratamento de esgotos. **Química Nova**, [S.I.], v. 35, n. 5, p. 968-973, dez. 2012. <http://dx.doi.org/10.1590/s0100-40422012000500019>.

QUEIROZ, F. B.; BRANDT, E. M. F.; AQUINO, S. F.; CHERNICHARO, C. A. L.; AFONSO, R. J. C. F. Occurrence of pharmaceuticals and endocrine disruptors in raw sewage and their behavior in UASB reactors operated at different hydraulic retention times. **Water Science and Technology**, [S.I.], v. 66, n. 12, p. 2562-2569, dez. 2012. <http://dx.doi.org/10.2166/wst.2012.482>.

RIVA, F.; CASTIGLIONI, S.; FATTORE, E.; MANENTI, A.; DAVOLI, E.; ZUCCATO, E. Monitoring emerging contaminants in the drinking water of Milan and assessing human risk. **International Journal of Hygiene and Environmental Health**, [S.I.], v. 221, n. 3, p. 451-457, abr. 2018. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheh.2018.01.008>.

SCHLEGER, Pamela Tainá; ANDRADE, Paula Andressa Wunderlich de. Poluentes emergentes: uma visão sistêmica. **Revista Latino Americana Ambiente & Saúde**, [S.I.], v. 5, n. 1, p. 92-98, ago. 2023. Disponível em: <https://rlas.uniplaclages.edu.br/index.php/rlas/article/view/13/15>. Acesso em: 01 maio 2026.

VERENITCH, S. S.; LOWE, C. J.; MAZUMDER, A. Determination of acidic drugs and caffeine in municipal wastewaters and receiving waters by gas chromatography–ion trap tandem mass spectrometry. **Journal of Chromatography A**, [S.I.], v. 1116, n. 1-2, p. 193-203, mai. 2006. <http://dx.doi.org/10.1016/j.chroma.2006.03.005>.