

INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA
DE MINAS GERAIS - *CAMPUS* ARCOS
ENGENHARIA MECÂNICA

Gabriel Junior Leal
Júlia Maria Leal Firme

**CARACTERIZAÇÃO FÍSICO-QUÍMICA DE BIOMASSA
LIGNOCELULÓSICA PARA AVALIAÇÃO DO POTENCIAL
PRODUTIVO DE GÁS DE SÍNTESE.**

Arcos - MG

GABRIEL JUNIOR LEAL
JÚLIA MARIA LEAL FIRME

**CARACTERIZAÇÃO FÍSICO-QUÍMICA DE BIOMASSA
LIGNOCELULÓSICA PARA AVALIAÇÃO DO POTENCIAL
PRODUTIVO DE GÁS DE SÍNTESE.**

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao
Curso de Engenharia Mecânica do Instituto Federal
de Educação, Ciência e Tecnologia de Minas Gerais .

Orientador: Prof. Dr.Reginaldo Gonçalves Leão
Junior

Arcos - MG

Catálogo na Fonte Biblioteca IFMG - Campus Arcos

L435c Leal, Gabriel Junior.

Caracterização físico-química de biomassa lignocelulósica para avaliação do potencial produtivo de gás de síntese. / Gabriel Junior Leal, Júlia Maria Leal Firme. - Arcos, 2025.

51 f. : il. color.

Orientador: Prof. Reginaldo Gonçalves Leão Junior. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Mecânica) - Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Minas Gerais - *Campus Arcos*.

1. Biomassa. I. Firme, Júlia Maria Leal. II. Leão Junior, Reginaldo Gonçalves (orientador). IV. Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Minas Gerais - *Campus Arcos*. V. Título.

CDD 662.65

Catálogo: Meriely Ferreira de Almeida - CRB-6/2760

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, expressamos nossa gratidão a Deus, pela força, sabedoria e serenidade que nos guiaram ao longo desta jornada, permitindo-nos superar cada obstáculo e alcançar este momento tão significativo.

Aos nossos pais e a todos que amamos, nosso mais profundo agradecimento por serem nosso alicerce em todos os momentos. Obrigado pela paciência, pelo amor incondicional e por acreditarem em nosso potencial, mesmo quando nós mesmos tivemos dúvidas. Sem o apoio, os conselhos e o carinho de vocês, esta caminhada seria infinitamente mais desafiadora.

Ao nosso orientador, Reginaldo, pela orientação dedicada, pela partilha de conhecimentos e pelas valiosas críticas construtivas que impulsionaram o aperfeiçoamento deste trabalho e nos ajudaram a crescer como profissionais e como pessoas. À nossa parceira de laboratório, Angélica, pela colaboração, troca de experiências e pelo comprometimento que tanto contribuíram para o sucesso deste projeto.

Por fim, agradecemos também um ao outro, pela parceria sólida, pela confiança mútua e pela determinação compartilhada em enfrentar os desafios com união e persistência. A realização deste TCC é, acima de tudo, o resultado de um esforço coletivo e de um trabalho em equipe.

A todos que fizeram parte dessa trajetória, nosso mais sincero e profundo obrigado.

RESUMO

A utilização da biomassa como fonte de energia não só apresenta um potencial energético significativo, mas também contribui simultaneamente para a produção de energia limpa e a solução de problemas ambientais. A produção de gás de síntese, obtido por meio de degradação térmica, demonstra a capacidade de gerar energia a partir da biomassa e reduzir a degradação ambiental, evitando o descarte inadequado ou o uso do material como fertilizante. Atualmente, a biomassa é utilizada em diversos processos termoquímicos, como a gaseificação. Nessa perspectiva, o conhecimento da composição química e das propriedades físicas da biomassa é fundamental para determinar a viabilidade de produzir subprodutos de interesse a partir de amostras específicas. Este projeto propõe o desenvolvimento de uma simulação computacional do fenômeno de gaseificação, com o objetivo de auxiliar na determinação do potencial energético da biomassa estudada, o bagaço de cana-de-açúcar, que é abundantemente encontrado na região de desenvolvimento do projeto. Por meio da análise BET, foi possível determinar a área superficial das amostras, com duas granulometrias distintas 0,68 mm e 2 mm e preparadas através da secagem em estufa para possibilitar o armazenamento prolongado. A análise BET permite que a simulação computacional resolva questões de química de superfície da biomassa, modelando-a em estado condensado e, assim, determinando as áreas superficiais das amostras para aplicação na simulação computacional.

Palavras-chave: Análise BET. Biomassa. Bagaço de Cana - de - Açúcar.

ABSTRACT

The use of biomass as an energy source not only presents significant energy potential but also simultaneously contributes to the production of clean energy and the solution of environmental problems. The production of syngas, obtained through thermal degradation, demonstrates the ability to generate energy from biomass and reduce environmental degradation, avoiding improper disposal or use of the material as fertilizer. Currently, biomass is used in various thermochemical processes, such as gasification. In this perspective, knowledge of the chemical composition and physical properties of biomass is essential to determine the feasibility of producing valuable by-products from specific samples. This project proposes the development of a computational simulation of the gasification phenomenon, with the objective of assisting in determining the energy potential of the studied biomass, sugarcane bagasse, which is abundantly found in the project's development region. Through BET analysis, it was possible to determine the surface area of the samples, with two different particle sizes, 0.68 mm and 2 mm, prepared by oven drying to enable prolonged storage. BET analysis allows the computational simulation to address surface chemistry issues of the biomass, modeling it in a condensed state and thus determining the surface areas of the samples for application in the computational simulation.

Keywords: BET Analysis. Biomass. Sugarcane Bagasse.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Fluxograma processo da produção do Bagaço de Cana.	19
Figura 2 – Representação dos Fenômenos de Adsorção e Dessorção	21
Figura 3 – Representação esquemática dos seis tipos de isotermas de adsorção. Setas azuis indicam laços de histerese, setas vermelhas, começo de multicamada.	25
Figura 4 – Representação esquemática da composição de mecanismos pelo método AMRMC.	27
Figura 5 – Granulometrias	29
Figura 6 – Teste de Densidade	30
Figura 7 – Tubo de Ensaio	31
Figura 8 – Granulometrias utilizadas na análise BET	32
Figura 9 – Amostras no equipamento usado para análise BET	33
Figura 10 – Isoterma amostra BC1809-1	36
Figura 11 – Isoterma amostra BC1809-2	36

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Compostos	27
Tabela 2 – Teste de Umidade	35
Tabela 3 – Dados da Análise BET das Amostras BC1809-1 e BC1809-2	37

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
SEP	Sistema Elétrico de Potência
IFMG	Instituto Federal de Minas Gerais
Conab	Companhia Nacional de Abastecimento
MME	Ministério de Minas e Energia
BET	Brunauer, Emmett, Teller
GESESC	Grupo de Estudos em Sistemas Térmicos e Simulação Computacional
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry
COOPERCALC	Cooperativa dos Produtores de Cachaça de Alambique da Região Calcária
RMG	Reaction Mechanism Generator
RM	Reaction Mechanism
AMRMC	Additive Methodology for Reaction Mechanism Composition
CEFET	Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

LISTA DE SÍMBOLOS

Θ	Fração de sítios ocupada
N^d	Sítios disponíveis
N^a	Molécula adsorvente
ρ	Taxa de adsorção
E	Energia de adsorção
α	Constante do sistema gás-sólido
β	Constante do sistema gás-sólido
k	Coefficiente de adsorção
K	Relação dos coeficientes de adsorção e dessorção
n_m	preenchimento da monocamada
n	quantidade total de gás adsorvido
C_S	concentração de saturação de um adsorvato (mol L^{-1})
B	constante relacionada à energia de interação com a superfície
Q_{BET}	capacidade máxima de adsorção do adsorvato na formação de monocamada (mol g^{-1})
m^2/g	metro quadrado por grama

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
1.1	Objetivos	15
<i>1.1.1</i>	<i>Objetivo geral</i>	<i>15</i>
<i>1.1.2</i>	<i>Objetivos específicos</i>	<i>15</i>
1.2	Justificativa	15
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	17
2.1	Caracterização da Biomassa	18
2.2	Armazenagem da Biomassa	19
2.3	Aproveitamento do bagaço de cana	19
2.4	Análise da Biomassa	21
<i>2.4.1</i>	<i>A teoria de Brunauer, Emmett e Teller (BET)</i>	<i>22</i>
<i>2.4.2</i>	<i>Isotermas</i>	<i>24</i>
2.5	<i>BioMass-Mech1.0: A new reaction mechanism for combustion, gasification and pyrolysis of lignocellulosic biomass.</i>	<i>26</i>
3	METODOLOGIA	29
3.1	Coleta das amostras	29
3.2	Análise BET	32
4	RESULTADOS	34
4.1	Amostras	34
4.2	BET	35
5	CONCLUSÃO	38
	REFERÊNCIAS	40
	APÊNDICE A – ISOTERMAS - CÓDIGO PYTHON	43

A.1	GESESC - Grupo de Estudo em Sistemas Térmicos e Simulação Computacional	43
A.1.1	<i>Caracterização Físico-Química de Biomassa Lignocelulósica Para Avaliação do Potencial Produtivo de Gás de Síntese - Isotermas . . .</i>	43
ANEXO A	– DADOS DA ANÁLISE BET - AMOSTRA BC1809-1.	47
ANEXO B	– DADOS DA ANÁLISE BET - AMOSTRA BC1809-2.	51

1 INTRODUÇÃO

Em 2023, a produção de biocombustíveis no Brasil atingiu um marco histórico, com a produção combinada de biodiesel e etanol totalizando quase 43 bilhões de litros. Este crescimento reflete a expansão do setor e a diversificação das fontes de energias renováveis no país (PRODUÇÃO..., 2024). Considerando a crescente demanda por energias renováveis, especialmente o biodiesel e o etanol, cuja produção gera uma quantidade significativa de biomassa, torna-se necessário desenvolver métodos e tecnologias que permitam o uso eficiente desses subprodutos. Dessa forma, a energia produzida pode contribuir para a redução da degradação ambiental.

O bagaço de cana, subproduto da produção de açúcar e álcool, já é amplamente utilizado na geração de energia através da queima em caldeiras. Contudo, essa aplicação possui um valor agregado relativamente baixo. Por outro lado, o bagaço de cana pode ser aproveitado para a produção de hidrogênio verde e gás de síntese, que possuem maior valor agregado e melhoram significativamente o potencial calorífico.(McKinsey & Company, 2023)

Processos termoquímicos como gaseificação e pirólise, permitem que a biomassa seja convertida em subprodutos com significativo potencial energético. Porém, esses tipos de processos dependem de fatores que impactam na cinética das reações e qualidade dos subprodutos. Fatores como umidade e quantidades estequiométricas, por exemplo, são fundamentais para a determinação do potencial energético da biomassa estudada.

Em razão das dificuldades de obtenção dos suprimentos necessários para realizar o processo de gaseificação da biomassa nos laboratórios do campus, o presente trabalho propôs o desenvolvimento de simulação computacional desse fenômeno, de modo a auxiliar na determinação dos principais parâmetros do potencial energético da biomassa. O trabalho incrementará o modelo numérico *BioMass-Mech 1.0* desenvolvido no GESESC (Grupo de Estudos em Sistemas Energéticos e Simulação Computacional.) utilizando a área BET para possibilitar que o modelo resolva problemas de química de superfície e adsorção de O_2 modelando a biomassa em estado condensado, ao contrário da versão atual, capaz de simular seus componentes apenas em fase gasosa.

1.1 Objetivos

1.1.1 *Objetivo geral*

O objetivo geral do trabalho é realizar a caracterização físico-química de amostras de bagaço de cana-de-açúcar, como forma de contribuir para o desenvolvimento de um mecanismo de reação em desenvolvimento pelo Grupo de Estudos em Sistemas Energéticos e Simulação Computacional(GESESC), voltado para o aproveitamento dos resíduos agrícolas regionais e obtenção do gás de síntese.

1.1.2 *Objetivos específicos*

- Coletar amostras em empresas regionais para a realização dos testes.
- Preparar as amostras para a devida armazenagem, por meio de Crivagem e Secagem.
- Verificar a homogeneidade das amostras por meio de verificação visual por medida de densidade.
- Analisar as amostras utilizando o método BET para determinar a área superficial.

1.2 Justificativa

Os processos de conversão termoquímica são fundamentais para a aproveitamento térmico da matéria orgânica, resultando em subprodutos com elevado potencial energético, como o gás de síntese, que é gerado por meio de uma série de reações químicas distintas. Além disso, esses processos produzem resíduos secundários, como carvão e cinzas.

Para compreender e otimizar essas reações, a simulação computacional é uma ferramenta crucial. Ela permite estudar com precisão o comportamento das transformações químicas envolvidas e analisar como os parâmetros do processo de gaseificação influenciam os resultados. O GESESC (Grupo de Estudos em Sistemas Energéticos e Simulação Computacional) tem trabalhado em um mecanismo de reação denominado *BioMass-Mech1.0: A new reaction mechanism for combustion, gasification and pyrolysis of lignocellulosic biomass* que consiste em um modelo robusto para pirólise e gaseificação da biomassa, sendo possível configurá-lo para diversos parâmetros operacionais. Para

que os resultados obtidos por esse modelo matemático sejam ainda mais eficazes, o valor da área superficial da biomassa é de suma importância.

Neste trabalho, são apresentadas as caracterizações físico-químicas da biomassa de bagaço de cana-de-açúcar, com o objetivo de realizar a análise BET, responsável por fornecer a área superficial. Esses resultados serão incorporados ao modelo *BioMass-Mech1*, permitindo que simulações de simulações heterogêneas, reações de superfície e fenômenos de adsorção sejam reproduzidos com maior fidelidade.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Os processos de conversão termoquímica, como a gaseificação, promovem o aproveitamento térmico da matéria orgânica, resultando em subprodutos com elevado potencial energético, como o gás de síntese, além de resíduos secundários, como carvão e cinzas. A gaseificação envolve uma série de reações químicas energeticamente induzidas, utilizando materiais orgânicos em um ambiente com atmosfera pouco oxidante, onde geralmente são empregadas quantidades de oxigênio abaixo da quantidade considerada estequiométrica para as reações de combustão dos componentes orgânicos da biomassa (SILVA; OLIVEIRA, 2024). Esse processo gera, entre outros subprodutos, o gás de síntese, que é composto principalmente por monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂), vapor d'água (H₂O), hidrogênio (H₂) e, em alguns casos, metano (CH₄) (BASU, 2010). O poder calorífico desse gás varia de 4 a 7 MJ/Nm³, dependendo das condições do processo (LV *et al.*, 2004), e sua produção resulta de uma combinação complexa de diferentes reações químicas.

O uso de simulação é crucial para estudar e otimizar o comportamento dessas reações químicas. A simulação permite analisar detalhadamente as transformações envolvidas e compreender como os parâmetros operacionais influenciam o processo de gaseificação (MANSARAY; GHALY, 1999). Nesse contexto, a parametrização de um modelo eficaz depende de uma caracterização físico-química precisa da biomassa. A área superficial da biomassa é um fator particularmente relevante, pois está diretamente relacionada à taxa de reação e à eficiência do processo (BASU, 2010; MANSARAY; GHALY, 1999).

No caso específico do bagaço de cana, uma biomassa com estrutura fibrosa e porosa, a área superficial exerce um papel fundamental na reatividade das partículas e na transferência de calor durante a gaseificação (TILMAN; JOHANSEN, 2004). Biomassas com maior área superficial permitem um maior contato entre os reagentes (como o oxigênio e o vapor d'água) e as partículas de biomassa, o que acelera as reações termoquímicas e aumenta a eficiência na produção de gás de síntese (LV *et al.*, 2004). Além disso, a estrutura porosa do bagaço de cana facilita a penetração de gases e a dispersão de calor, influenciando positivamente o desempenho do processo (MANSARAY; GHALY, 1999).

Portanto, ao considerar a área superficial da biomassa na modelagem de processos

de gaseificação, é possível alcançar simulações mais precisas, que reproduzem melhor o comportamento real das reações e permitem otimizar a produção de energia a partir do bagaço de cana (BASU, 2010; TILMAN; JOHANSEN, 2004).

2.1 Caracterização da Biomassa

A produção de Biocombustíveis no Brasil está em constante crescimento. Em 2023, o país colheu cerca de 677 milhões (SERRA *et al.*, 2020) de toneladas de cana-de-açúcar, cultivadas em uma área de aproximadamente 8,35 milhões de hectares (CONAB, 2023). Um dos principais subprodutos desse processo, o bagaço de cana, tem um papel essencial na geração de energia sustentável. Nesse mesmo ano, foram gerados 12.410 MW de energia a partir de biomassa proveniente do setor sucroenergético, com a produção distribuída entre 442 empreendimentos no país (MME, 2023).

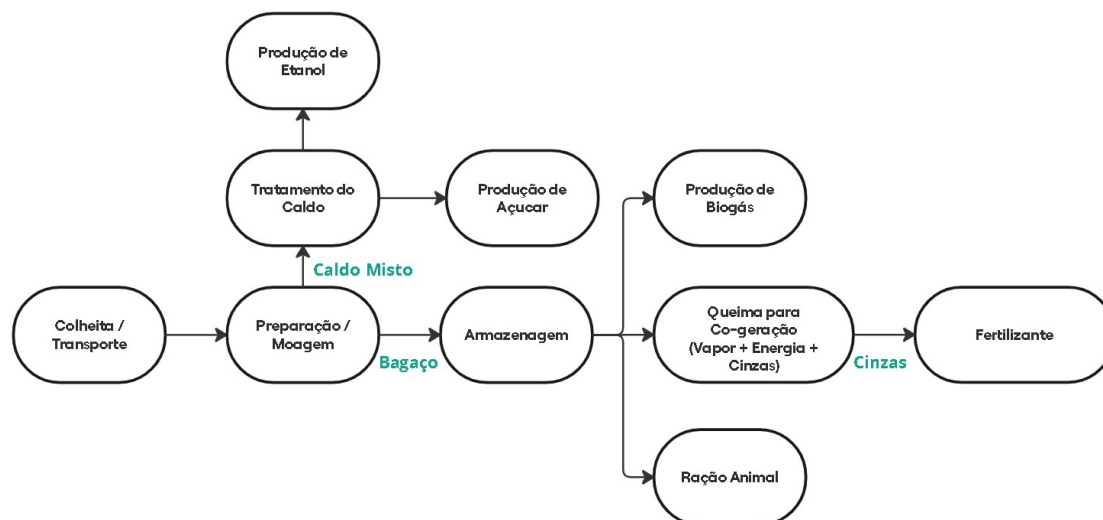
No entanto, a biomassa ainda é amplamente utilizada em sua forma bruta, saindo diretamente do processo de produção. Em muitos casos, o único tratamento realizado é a secagem em pátios comuns, sem que sejam feitos estudos aprofundados para otimizar seu potencial energético. Isso indica que há uma grande oportunidade para maximizar a eficiência e a geração de energia a partir desse recurso renovável, seja por adoção de processos de preparo da biomassa, ou até mesmo no uso de parâmetros de queima adequados para as características da biomassa.

No setor sucroenergético, a biomassa provém principalmente do bagaço gerado na moagem da cana-de-açúcar. Após a extração do caldo, o bagaço, que é o resíduo sólido, se torna uma importante fonte de energia, embora seu potencial energético nem sempre seja totalmente explorado. Ele é amplamente utilizado na cogeração, sendo queimado para produzir vapor e eletricidade. Além disso, pode ser aproveitado na produção de biogás ou como ração animal, conforme as necessidades operacionais, representadas no ciclo de produção da Figura 1.

Do processamento da cana de açúcar, dois resíduos lignocelulósicos são gerados: o bagaço e a palha da cana-de-açúcar. Esses materiais são constituídos, em sua maioria, por celulose, hemicelulose e lignina, cujas proporções variam de acordo com as condições do solo onde a cana foi cultivada. Em termos gerais, as proporções são aproximadamente 40% de celulose, 40% de hemicelulose e 20% de lignina, embora esses valores possam sofrer

alterações dependendo das características ambientais e do manejo agrícola (ROCHA; PEREIRA; OLIVEIRA, 2023)

Figura 1 – Fluxograma processo da produção do Bagaço de Cana.



Fonte: Acervo próprio

2.2 Armazenagem da Biomassa

O bagaço de cana é um produto da extração do caldo da cana-de-açúcar. Mesmo após essa etapa, ele ainda contém cerca de 3% de açúcar, além de apresentar elevado teor de umidade e atividade microbiana, o que pode levar à fermentação. A fermentação é um processo exotérmico que deteriora a biomassa, afetando suas propriedades. Esse fenômeno ocorre devido à ação de fungos da família *Basidiomycota*, que decompõem os polissacarídeos e causam a podridão branca, além de degradar a lignina, elemento central do estudo (SANTOS *et al.*, 2011).

2.3 Aproveitamento do bagaço de cana

No passado, o bagaço de cana era frequentemente descartado em grandes pilhas, sendo considerado um resíduo sem valor. Esse desperdício não apenas ocupava espaço, mas também resultava na perda de seu potencial energético durante a decomposição.

A partir dos anos 1990, no entanto, uma mudança significativa ocorreu. O setor sucroalcooleiro começou a aproveitar o bagaço como substituto para a madeira na geração de vapor nas caldeiras das usinas (DIAS *et al.*, 2009). Esse avanço foi impulsionado por diversos fatores, incluindo o desenvolvimento de novas tecnologias e o aumento dos preços da energia elétrica e dos combustíveis fósseis (WALTER *et al.*, 2006). Essa evolução permitiu que o bagaço fosse utilizado de forma mais abrangente para gerar calor, eletricidade e até mesmo tração.

A introdução do bagaço como fonte de energia renovável transformou profundamente o setor, que passou a ser conhecido como sucroenergético, refletindo sua importância na matriz energética do Brasil. Essa mudança trouxe benefícios não só econômicos, mas também ambientais. O uso do bagaço na geração de energia contribuiu para a redução das emissões de gases de efeito estufa, ao substituir fontes de energia mais poluentes, como os combustíveis fósseis, e reduzir a dependência de termelétricas movidas a carvão ou óleo (WALTER *et al.*, 2006)(DIAS *et al.*, 2009).

Além da bioenergia, o bagaço de cana encontra aplicações em diversas áreas. Sua utilização na fabricação de bioplásticos e outros materiais biodegradáveis oferece uma alternativa ecológica ao plástico tradicional, ajudando a diminuir o impacto ambiental de materiais descartáveis. A extração de nanocelulose do bagaço, por exemplo, mostrou-se promissora para a produção de biocompósitos de alta performance, utilizados em embalagens e outras aplicações industriais(MORAIS *et al.*, 2013). No setor de papel e celulose, o bagaço substituiu a madeira na produção de papel e papelão, contribuindo para a preservação de florestas.

O bagaço também é utilizado na alimentação animal e na produção de compósitos para a construção civil, incluindo a formulação de cimentos e outros materiais com menor pegada de carbono. A incorporação de fibras residuais na fabricação de compósitos cimentícios contribuiu para a sustentabilidade na construção, reduzindo o uso de materiais tradicionais com maior impacto ambiental(SAVASTANO *et al.*, 2000).

Essas diversas aplicações mostram como o aproveitamento do bagaço de cana pode ser integrado a cadeias produtivas que visam à sustentabilidade, reduzindo o desperdício e criando valor a partir de um resíduo que antes era visto como problemático. Com a contínua evolução tecnológica e o desenvolvimento de políticas de incentivo, o potencial

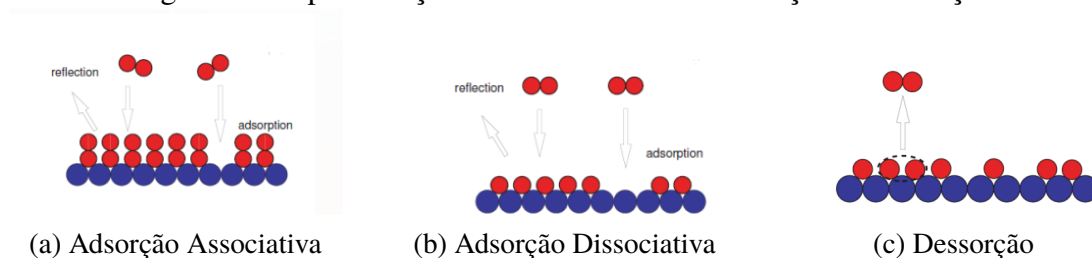
de uso do bagaço pode ser ainda mais expandido, reforçando sua importância na economia e na proteção ambiental.

2.4 Análise da Biomassa

A área superficial é definida como a razão entre a área superficial absoluta de um sólido e sua massa, expressa em m^2/g . Esta medida abrange tanto as superfícies externas das partículas sólidas quanto todas as porções das superfícies internas acessíveis ao adsorvato (conceito que será abordado posteriormente) (ACEVEDO; ROCHA; BERTOLINO, 2021). A magnitude da área superficial é influenciada por diversas características, tais como densidade, distribuição dimensional, forma das partículas e regularidade da superfície.

É possível determinar a área superficial, o tamanho dos poros e sua distribuição em uma ampla variedade de materiais porosos através da medição da área ocupada por uma quantidade específica de moléculas de gás adsorvidas na superfície desses materiais. Esse processo envolve a adsorção e dessorção de um gás não reativo na superfície do material e é comumente analisado pela técnica BET (Brunauer-Emmett-Teller). A ideia central oriunda da teoria de Langmuir, que construiu o modelo de adsorção em monocamada. A adsorção refere-se à adesão física ou ligação de íons e moléculas à superfície, enquanto a dessorção é o processo inverso, no qual essas partículas se desprendem das superfícies (CALPA, 2011). As Figuras 2a e 2b, representam os fenômenos de adsorção associativa e adsorção dissociativa respectivamente. Já a Figura 2c, representa o fenômeno de dessorção.

Figura 2 – Representação dos Fenômenos de Adsorção e Dessorção



Fonte: (SIERVO, 2022)

A adsorção é viabilizada pelo desequilíbrio de cargas nas moléculas presentes na

superfície do material. Essas moléculas, em comparação com as do interior do material, possuem pelo menos uma ligação atômica a menos. Como resultado, essas áreas superficiais permitem que outras moléculas se adsorvam a elas, buscando atingir um estado de equilíbrio (CALPA, 2011). O gás que participa desse processo de adsorção é denominado adsorvato, enquanto o material sob análise é chamado de adsorvente.

Existem diferentes tipos de adsorção, que podem ser classificados como físicos ou químicos. Na fisissorção, também conhecida como adsorção física, as moléculas do adsorvato são atraídas para a superfície do material, formando ligações de Van der Waals. Essas forças geradas são fracas e atuam a longa distância, o que torna possível a dessorção. Na fisissorção, as características químicas do material são conservadas, e o material é adsorvido em múltiplas camadas, mas não sem antes terminar a primeira. (NASCIMENTO, 2014);(CALPA, 2011)

Já no processo químico, conhecido como quimissorção, ocorre a formação de ligações covalentes ou por pontes de hidrogênio. Essas interações são fortes e de curto alcance. Na quimissorção, o material sofre alterações químicas, e a adsorção acontece em apenas uma camada. (CALPA, 2011)

Os processos físico-químicos, como a adsorção, dependem de três fatores principais: a quantidade total de superfície disponível, a temperatura de trabalho e a pressão parcial do adsorvato. O método comumente utilizado para a análise da área superficial é a fisissorção, que permite o preenchimento completo dos poros do material à medida que a pressão relativa do adsorvato aumenta.

2.4.1 A teoria de Brunauer, Emmett e Teller (BET)

Em 1916, Langmuir propôs uma equação para descrever os processos de adsorção e dessorção (CALPA, 2011). Em sua teoria ele considerou a superfície a ser coberta pelo adsorvato (substância que se liga fisicamente ao sólido) sendo um arranjo de N^d sítios disponíveis, equivalentes e independentes que podem ser adsorvidos por uma molécula N^a , assim a fração de sítios ocupados seria dada pela Equação 2.1.

$$\theta = \frac{N^a}{N^d} \quad (2.1)$$

De acordo com a teoria a adsorção acontece em monocamadas de forma natural e em baixas pressões.

A taxa de adsorção ρ depende da pressão e dos sítios desocupados na superfície ($1 - \theta$), já a taxa de dessorção depende dos sítios ocupados θ e do valor absoluto da energia de adsorção, E . Em casos onde os valores de θ e ρ para as taxas de adsorção e dessorção são iguais, existe um equilíbrio. De acordo com a Equação 2.2, esse equilíbrio é zero (CALPA, 2011).

$$\frac{dNa}{Nd} = \alpha\rho(1 - \theta) - \beta\theta \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) = 0 \quad (2.2)$$

Sendo α e β , constantes características do sistema gás-sólido.

Em um caso ideal, as moléculas adsorvidas não apresentam interação lateral umas com as outras, logo, o processo de dessorção será independente da superfície coberta. Em sistemas onde há adsorção com energia de ativação constante (E), válida em toda a monocamada da superfície, a Equação 2.2 pode ser reescrita na forma da Equação 2.3, da isoterma de Langmuir.

$$\theta = \frac{b\rho}{1 + b\rho} \quad (2.3)$$

O coeficiente de adsorção (b) é exponencialmente relacionado com o valor absoluto da energia de adsorção (E), dado pela Equação 2.4

$$b = K \exp\left(\frac{E}{RT}\right) \quad (2.4)$$

Sendo (K) equivalente à relação entre os coeficientes de adsorção e dessorção α e β respectivamente. (CALPA, 2011)

Em sua teoria, Langmuir assume que a primeira camada possui energia consideravelmente maior quando comparada com a segunda camada, e essa diferença se estende para as camadas posteriores. Logo, para formar multicamadas, seria necessária uma pressão muito maior que a necessária para a formação de apenas uma camada. Essa diferença de pressão e energia causaria uma descontinuidade em algumas isotermas (que serão abordadas posteriormente), porém, em outras isotermas, essa descontinuidade não

é vista, pois a interação entre moléculas adsorvidas não se enquadra nesse modelo de Langmuir (CALPA, 2011).

A forma linear do modelo de Langmuir, que pode ser encontrado através da Equação 2.5. Permite, em função da pressão, encontrar a área superficial do adsorvato (material sólido em contato com o adsorvente). No entanto, não são em todos os casos em que esta linearidade implica em conformidade com o modelo proposto, por isso, houve diversas propostas de modificação dessa teoria.

$$\frac{\rho}{n} = \frac{1}{n_m b} + \frac{\rho}{n_m} \quad (2.5)$$

A teoria BET, publicada pela primeira vez em 1938 e nomeada em homenagem a seus desenvolvedores Brunauer, Emmett e Teller, é um modelo isotérmico que estende a teoria cinética do modelo de Langmuir, para permitir uma maior adsorção, para formação de duas, três ou mais camadas na superfície. (PAAR, 2023) A teoria BET considera que as forças envolvidas no processo de adsorção, são semelhantes às forças de Van der Waals, além disso, a teoria também considera que a adsorção física não está limitada apenas a monocamadas, permitindo a formação de múltiplas camadas (NASCIMENTO, 2014). A equação que representa a teoria BET é representada na Equação 2.6.

$$q_e = \frac{BC_e Q_{BET}}{(C_s - C_e) \left[1 + (B - 1) \left(\frac{C_e}{C_s} \right) \right]} \quad (2.6)$$

Onde, C_s é a concentração de saturação de um adsorvato (mol L^{-1}), B é a constante relacionada à energia de interação com a superfície e Q_{BET} é a capacidade máxima de adsorção do adsorvato na formação de monocamada (mol g^{-1}).

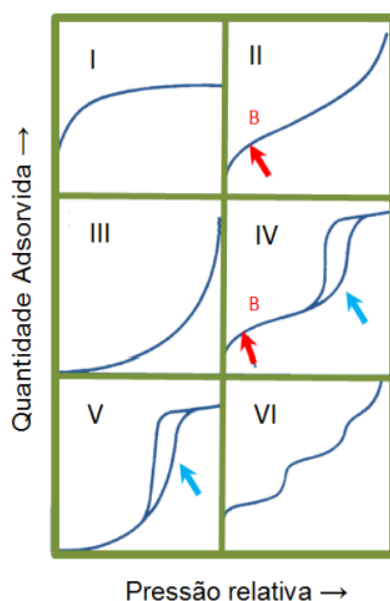
Informações como área superficial do material e estrutura porosa, podem ser obtidas através das isotermas de BET.

2.4.2 Isotermas

As isotermas são obtidas a partir dos processos de adsorção e dessorção de gases não reativos, sendo o nitrogênio o gás mais comumente utilizado para esse propósito. Elas têm como objetivo expressar a quantidade de gás adsorvido pelo volume (V_a) em

condições padrão de temperatura e pressão. A pressão é expressa pela pressão relativa ($\frac{P}{P_0}$), que é a relação entre a pressão de trabalho e a pressão de vapor do gás na temperatura utilizada. A Figura 3, ilustra os 6 tipos de isotermas ;

Figura 3 – Representação esquemática dos seis tipos de isotermas de adsorção. Setas azuis indicam laços de histerese, setas vermelhas, começo de multicamada.



Fonte: (CALPA, 2011)

De acordo com a IUPAC (*International Union of Pure and Applied Chemistry*), as isotermas são classificadas da seguinte maneira: a isoterma do tipo I é característica de sólidos com microporosidade, onde a adsorção acontece em pressões relativamente baixas; as isotermas II e III ocorrem em sólidos não porosos ou em sólidos macroporosos. Ao passo que a isoterma tipo II apresenta um ponto de inflexão que corresponde à completa formação da monocamada e início da multicamada, a isoterma tipo III não o apresenta devido às fracas interações entre adsorvente e adsorvato; as isotermas IV e V apresentam um laço de histerese, que acontece quando as curvas de adsorção e dessorção não coincidem, sendo típicas de materiais mesoporosos, com preenchimento em multicamadas; por fim, as isotermas tipo VI são típicas de tipos especiais de carbono, não sendo muito comuns. (CALPA, 2011)

Variáveis como Inclinação, Intercepto, Coeficiente de Correlação (r) e Constante C são fundamentais para avaliar a precisão da isoterma e validar a análise BET. A Constante C está relacionada à energia de adsorção na primeira camada, sendo seu valor indicativo da magnitude das interações entre adsorvato e adsorvente (TECH,). O Coeficiente de Correlação (r) mede o quão bem os resultados obtidos se ajustam ao modelo BET (LIBRETEXTS, 2024). O Intercepto, por sua vez, representa o ponto onde a linha cruza o eixo y . Já a Inclinação é a taxa de variação no gráfico BET (Blog Minitab, 2024).

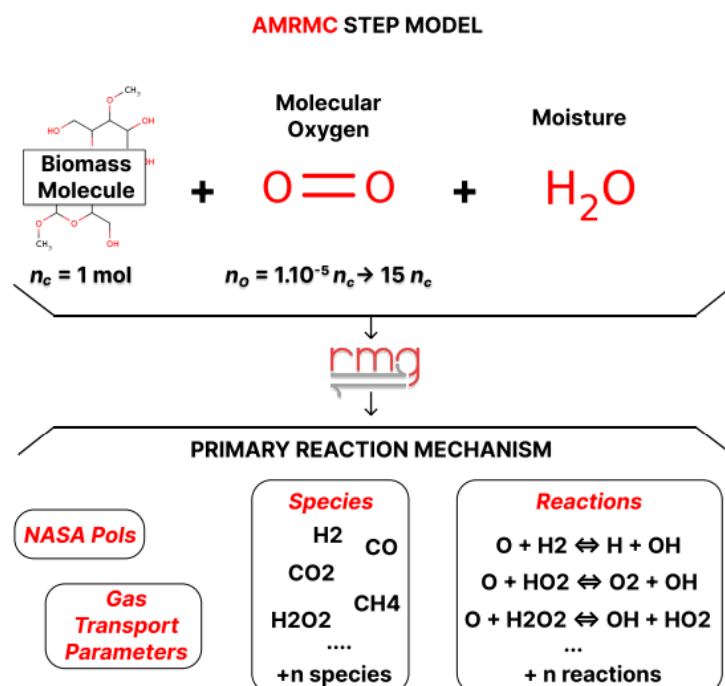
2.5 BioMass-Mech1.0: A new reaction mechanism for combustion, gasification and pyrolysis of lignocellulosic biomass.

As características do modelo a serem complementadas são detalhadas a seguir, de forma a esclarecer a metodologia utilizada: O processo denominado *Additive Methodology for Reaction Mechanism Composition* (AMRMC) refere-se a uma metodologia de desenvolvimento de mecanismos de reação, utilizada internamente no grupo de pesquisa GESESC (Grupo de Estudos em Sistemas Energéticos e Simulação Computacional), onde este trabalho foi desenvolvido. O objetivo desta metodologia é reduzir a quantidade de memória RAM e poder de processamento necessários para a composição de mecanismos de reação (RMs) em sistemas com múltiplas moléculas de alta complexidade.

Trata-se, efetivamente, de uma estratégia "*divide and conquer*", na qual os recursos computacionais para a geração automática do RM são distribuídos em processos distintos. Esta metodologia emprega o *software Reaction Mechanism Generator* (RMG) para compor um mecanismo de reação da biomassa estudada, criado a partir de seus componentes mais simples, conforme mostrado na Figura 4. Na versão atual do mecanismo, a biomassa é modelada como composta por celulose, hemicelulose e lignina. As proporções de cada componente são flexíveis, podendo ser ajustadas pelo usuário de acordo com o tipo de biomassa a ser estudada. Esta composição, nas proporções corretas, é suficientemente aceitável para representar um grande número de fontes, desde madeira in natura ou processada, até bagaço de cana-de-açúcar e palha de diversos vegetais.

Com exceção da lignina, geralmente um composto de menor abundância na biomassa lignocelulósica, os demais componentes foram representados em sua forma

Figura 4 – Representação esquemática da composição de mecanismos pelo método AMRMC.



monomérica. A hemicelulose, L-arabino-(4-O-methyl-D-glucurono)-D-xylan, devido à sua complexidade molecular, foi modelada como composta fundamentalmente por D-Xilose, L-Arabinose e D-Glicose, conforme descrito na Tabela 1.

Tabela 1 – Compostos

Composto	Fórmula Molecular	CAS	PubChem CID
D-Xilose	C ₅ H ₁₀ O ₅	10257-31-5	644160
L-Arabinose	C ₅ H ₁₀ O ₅	87-72-9	439195
D-Glicose	C ₆ H ₁₂ O ₆	2280-44-6	5793
Celulose	C ₁₄ H ₂₆ O ₁₁	9004-34-6	14055602
Lignina	C ₈₁ H ₉₂ O ₂₈	8068-03-9	73555271

Fonte: Acervo próprio

A estruturação de cada etapa de composição é demonstrada na Figura 4, considerando uma concentração molar unitária ($n_{bio} = 1$ mol) da molécula componente de biomassa em cada execução do RMG, uma variação na disponibilidade de O_2 molecular

entre $0 : n_{bio}$ mol e $15 : n_{bio}$ mol, e uma disponibilidade de H_2O variando entre $0 : n_{bio}$ e $1 : n_{bio}$.

Para cada estágio de composição do mecanismo, quatro análises computacionais foram realizadas com o grupo de moléculas de biomassa então incorporados ao modelo, a saber:

1. Análise de chama adiabática estequiométrica;
2. Combustão estequiométrica em reator de gás ideal com pressão constante;
3. Gaseificação a seco em reator de leito fixo e pressão constante;
4. Pirólise a seco em reator de leito fixo e volume constante.

As simulações são realizadas utilizando a suíte computacional Cantera, uma ferramenta de código aberto originalmente desenvolvida por Dr. Dave Goodwin (1957-2012) para a solução de problemas de cinética química, termodinâmica e processos de transporte (GOODWIN *et al.*, 2022).

Sistemas ideais compostos por frações molares unitárias de cada um dos compostos foram utilizados em cada um dos ciclos de simulação. Um mol de D-Xilose foi utilizado para o primeiro RM, um mol de D-Xilose adicionado a mais um mol de L-Arabinose para o segundo RM, um mol de D-Xilose, um mol de L-Arabinose e um mol de celulose para o terceiro RM, e assim por diante até o estudo de todos os compostos presentes na versão atual do modelo no RM global. Em todos os casos, o sistema foi considerado com $n_{H_2O} = 0$ e disponibilidade de oxigênio condizente com o tipo de estudo; frações de n_{O_2} estequiométricas para análises de combustão, limitadas para estudos de gaseificação e nulas para simulações de pirólise.

Diagramas de Percurso de Reação também foram gerados rastreando os percursos dos elementos C, H e O. O suporte para análises químicas da oxidação do N_2 ainda não está disponível na versão atual do mecanismo.

A parametrização do modelo por sua vez depende de uma caracterização físico-química precisa da biomassa investigada, justificando uma avaliação do teor de umidade, componentes voláteis, cinzas e carbono fixo, assim como uma análise elementar e do poder calorífico do material amostrado.

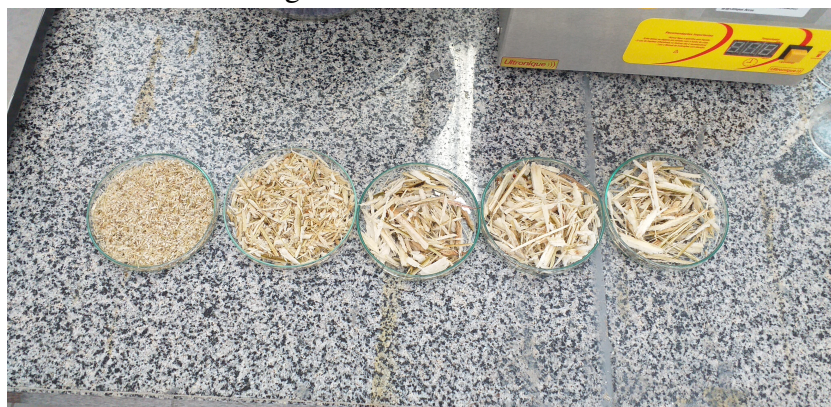
3 METODOLOGIA

3.1 Coleta das amostras

Para colher e padronizar as amostras de bagaço de cana, foi selecionado um dos engenhos que integra a COOPERCALC MG, localizado no município de Córrego Fundo, MG, especializado na produção artesanal de cachaça. A escolha garantiu que as amostras fossem processadas utilizando o mesmo padrão de equipamento e que a cana-de-açúcar fosse colhida em áreas com características semelhantes, assegurando a uniformidade dos resultados. As amostras foram coletadas *in natura* logo após a moagem da cana e acondicionadas em sacos plásticos para transporte ao laboratório Multifuncional do Instituto Federal de Minas Gerais (IFMG) - *Campus Arcos*.

O processamento das amostras foi realizado em várias etapas, seguindo um padrão bem estabelecido para garantir a precisão dos resultados. Inicialmente, as amostras foram trituradas e peneiradas, permitindo sua separação por granulometria, sendo elas: menor que 2mm (passante), 2mm, 4,75mm, 8mm e 16mm, conforme mostrado na Figura 5.

Figura 5 – Granulometrias

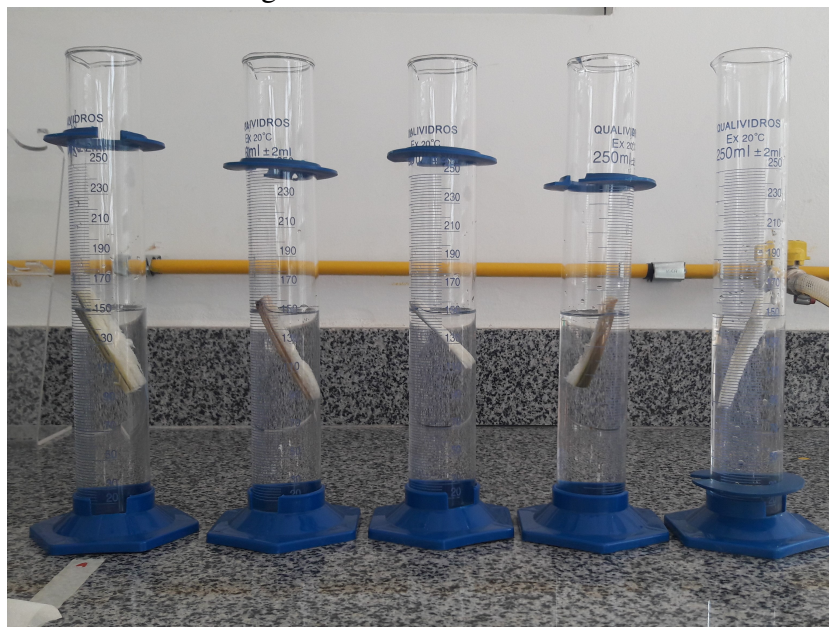


Fonte: Acervo próprio

Nessa fase, foram realizados uma série de testes físicos para obter um entendimento mais detalhado das características de cada amostra, tal como a densidade das amostras, que permitiu assim avaliar de forma visual a homogeneidade das amostras, conforme apresentado na Figura 6. Paralelamente, foram conduzidos testes para determinar a temperatura ideal de secagem. Amostras com diferentes granulometrias foram submetidas

à estufa em variadas temperaturas, e durante o processo de secagem, medições regulares da massa das amostras foram realizadas. Esses dados permitiram identificar a temperatura mais eficiente para a secagem do bagaço de cana-de-açúcar.

Figura 6 – Teste de Densidade



Fonte: Acervo próprio

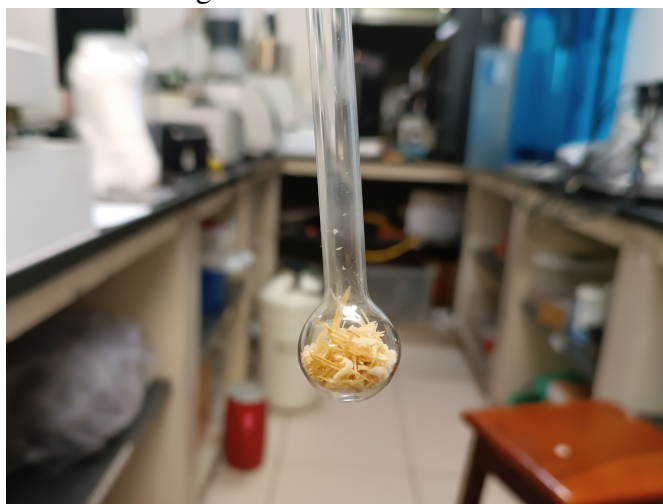
A termogravimetria (TG) foi utilizada para avaliar a variação da massa em função da temperatura, permitindo também identificar a temperatura de início da degradação, que ocorre entre 100°C e 200°C para o bagaço de cana. (SANTOS *et al.*, 2011).

Para realizar as análises deste trabalho, foi necessário remover a umidade da biomassa para evitar sua fermentação. Ao mesmo tempo, foi crucial que a temperatura de secagem não ultrapassasse 100°C, a fim de prevenir a degradação do material (SANTOS *et al.*, 2011). Com base nos dados obtidos através da termogravimetria, foram escolhidas as temperaturas de 40°C, 60°C e 70°C para avaliar o desempenho da secagem em estufa. Essas temperaturas estão dentro da faixa de segurança indicada pela termogravimetria, com 70°C ligeiramente acima, mas ainda segura para evitar a degradação da matéria

O preparo e envio das amostras para a análise BET foram etapas cruciais no desenvolvimento deste trabalho. Inicialmente, as amostras foram enviadas para análise

com diferentes granulometrias, no entanto, devido ao espaço limitado no equipamento, essa abordagem não funcionou como planejado. Amostras de granulometria maior não puderam ser inseridas corretamente no balão de ensaio, que possui um pescoço estreito conectado a uma esfera, conforme a Figura 7, o que dificultou a acomodação das partículas maiores. Além disso, problemas durante o processamento resultaram na degradação de algumas amostras, especialmente as de granulometria mais fina, comprometendo a obtenção de resultados confiáveis.

Figura 7 – Tubo de Ensaio



Fonte: Acervo próprio

Posteriormente, novas amostras foram coletadas. Durante o preparo, foi incluído um novo processo de trituração para garantir granulometrias menores. Logo, após o processo de trituração das amostras, estas foram crivadas e as amostras com granulometria igual ou superiores a 4,75mm foram levadas há um moedor de bancada, que por sua vez, reduzia as amostras em granulometrias menores, sendo elas: 2 mm e 0,68 mm conforme apresentado na Figura 8. As amostras foram então levadas à estufa, mantidas a uma temperatura média de 70°C, até estarem completamente secas. Após a secagem, foram embaladas em sacos tipo ziploc® e encaminhadas para a análise BET.

Figura 8 – Granulometrias utilizadas na análise BET



Fonte: Acervo próprio

3.2 Análise BET

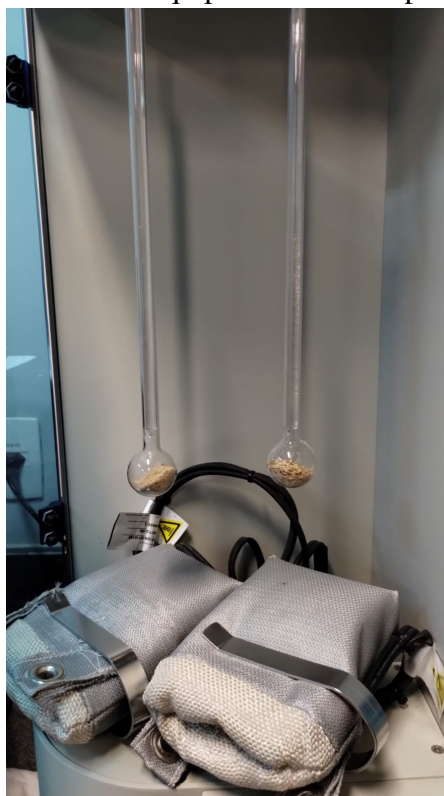
A análise BET foi conduzida em parceria com o Departamento de Engenharia de Materiais do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais (CEFET-MG), em Belo Horizonte, MG. O aparelho utilizado na realização das análises foi um Quantachrome® modelo Nova 2000. As amostras analisadas, conforme mencionado anteriormente, apresentavam granulometrias de 0,68 mm e 2 mm, sendo identificadas como BC1809-1 e BC1809-2, respectivamente. As massas das amostras analisadas e utilizadas na análise BET foram de 1,3906 g e 0,4909 g, respectivamente, seguindo a metodologia estabelecida pela ISO 9277:2022, intitulada Determinação da área superficial específica de sólidos por adsorção de gás — método BET, que institui os métodos para calcular a área superficial específica de sólidos utilizando a equação de Brunauer, Emmett e Teller (BET). A norma descreve os procedimentos necessários para medir a quantidade de gás adsorvido sob diferentes pressões e temperaturas, permitindo assim o cálculo preciso da área superficial das amostras (STANDARDIZATION, 2010). A Figura 9 apresenta as amostras no equipamento utilizado para a análise BET.

Inicialmente, as amostras passaram por um processo de desgaseificação, no qual foi aplicado vácuo juntamente com uma determinada temperatura. No caso das amostras em questão, a temperatura utilizada foi de 100°C, com o objetivo de remover possíveis

moléculas de água ou contaminantes que pudessem interferir nos resultados da análise. Essa etapa teve duração de 24 horas.

Após a conclusão desse processo, as amostras são colocadas em uma célula de condutividade térmica, onde é introduzido o gás a ser adsorvido, normalmente nitrogênio, utilizado nas análises a uma temperatura de 77 K. A adsorção ocorre quando as moléculas do gás são atraídas para a superfície da amostra, formando ligações físicas. O gás passa pela amostra e o que não é adsorvido retorna para a célula, passando por um potenciômetro registrador. Esse dispositivo determina a quantidade de gás adsorvida pela amostra através da queda de pressão, monitorando a quantidade de gás adsorvida em cada ponto de pressão, permitindo assim a criação da isoterma de adsorção e o cálculo da área superficial da amostra.

Figura 9 – Amostras no equipamento usado para análise BET



Fonte: Acervo próprio

4 RESULTADOS

Ao longo deste trabalho, foi realizada uma série de testes e análises, cujos resultados são apresentados neste capítulo. Esses resultados, além de serem fundamentais para a compreensão do comportamento da biomassa estudada, servirão de base para o modelo matemático em desenvolvimento pelo Grupo de Estudos em Sistemas Energéticos e Simulação Computacional (GESESC).

Neste capítulo, são expostos os dados referentes aos testes de secagem e à análise BET, utilizada para determinar a área superficial da biomassa. Além disso, são destacados os principais pontos do desenvolvimento do projeto, assim como as características da biomassa utilizada, evidenciando os desafios e as descobertas que guiaram o avanço da pesquisa.

4.1 Amostras

A coleta, preparação e armazenamento adequado das amostras desempenharam um papel crucial ao longo deste estudo. Como os testes se estenderam por várias semanas, foi necessário preparar as amostras e levá-las à estufa para remover a umidade, evitando assim a degradação causada por fermentação ou pelo aparecimento de fungos.

Um aspecto essencial desse processo foi garantir que a secagem das amostras fosse eficiente, sem comprometer sua integridade devido a variações de temperatura. Para isso, foram realizados testes em laboratório com o objetivo de determinar a temperatura ideal, que permitisse a secagem eficaz das amostras sem causar qualquer degradação.

Os testes foram conduzidos em três diferentes temperaturas: 45°C, 60°C e 70°C. Vale ressaltar que o bagaço de cana começa a se degradar quando a temperatura atinge valores próximos ou superiores a 100°C, perdendo algumas de suas propriedades e características. Além disso, foi mantido o padrão de cinco granulometrias distintas (<2 mm, 2 mm, 4,75 mm, 8 mm e 16 mm) durante a secagem.

A partir dos dados obtidos, gerou-se a Tabela 2 que apresenta a porcentagem de umidade perdida pelas amostras, além de identificar o melhor desempenho das combinações de temperatura e granulometria. Com base nos resultados, observou-se que as amostras com menor granulometria, especialmente aquelas com partículas passante e

com 2 mm, apresentaram uma taxa significativamente elevada de perda de umidade. Isso demonstra que, à medida que a granulometria diminui, a área superficial das partículas aumenta, facilitando a evaporação da umidade.

Tabela 2 – Teste de Umidade

Granulometria	Porcentagem de umidade perdida		
	45°	60°	70°
<2 mm	55%	53,98%	56,24%
2 mm	59,31%	59,38%	74,1%
4.75 mm	64,3%	60,73%	49,19%
8 mm	61,49%	59,73%	48,36%
16 mm	59,23%	58,69%	44,31%

Fonte: Acervo Próprio

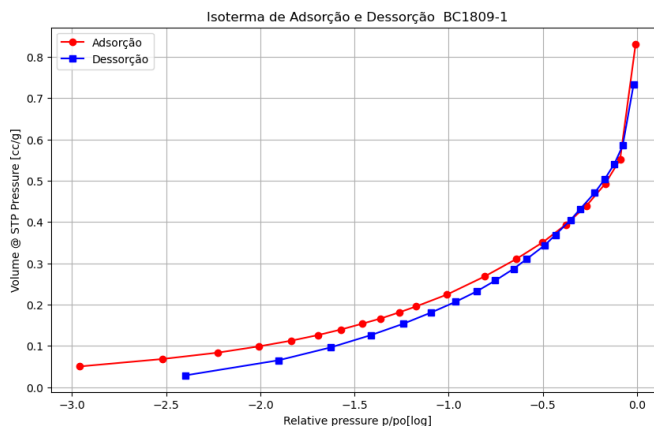
Esses resultados são particularmente relevantes, uma vez que as amostras com granulometria inferior a 2 mm foram selecionadas para a realização da análise que mede a área superficial específica da biomassa. Logo, a combinação entre temperatura adequada e granulometria reduzida mostrou-se eficaz na otimização da secagem das amostras, além de fornecer dados valiosos para os processos subsequentes de análise e gaseificação.

4.2 BET

A análise BET permitiu a obtenção de isotermas de adsorção, além da determinação da área superficial do material analisado (bagaço de cana). Conforme a IUPAC, a curva que mais se assemelha às obtidas nos testes é a curva III, visível na Figura 3. As isotermas resultantes dos testes podem ser observadas nas Figuras 10 e 11.

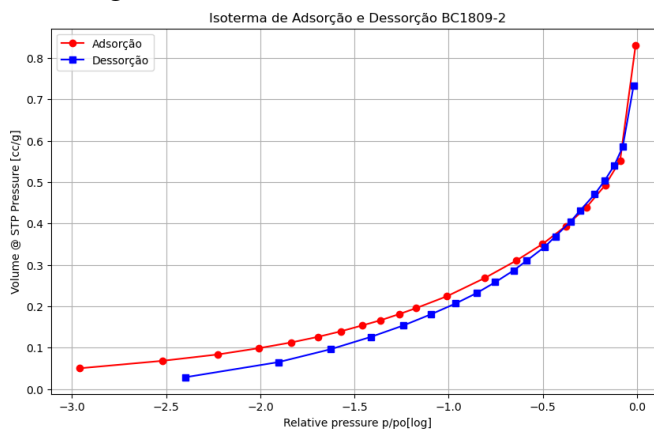
A curva vermelha representa o processo de adsorção, no qual o material é preenchido pelo gás até alcançar a pressão de saturação do sistema. Já a curva azul ilustra o processo de dessorção, onde o gás é removido da amostra. As isotermas obtidas indicam um comportamento característico de materiais macroporosos ou não porosos. Vale ressaltar que, devido às características dessa análise, que envolvem amostras com granulometrias muito finas, pode haver algum tipo de interferência causada pelas granulometrias utilizadas.

Figura 10 – Isoterma amostra BC1809-1



Fonte: Acervo próprio

Figura 11 – Isoterma amostra BC1809-2



Fonte: Acervo próprio

Os valores da área superficial encontrados para as amostras estão apresentados na Tabela 3. Para ambas as amostras, o valor encontrado para a área superficial pode ser aproximado de 1 m²/g. Esse valor é considerado baixo para materiais porosos, mas é elevado para materiais não porosos.

Tabela 3 – Dados da Análise BET das Amostras BC1809-1 e BC1809-2

Variável	BC1809-1	BC1809-2
<i>Slope</i> (Inclinação)	3587,746 g ⁻¹	3783,119 g ⁻¹
<i>Intercept</i> (Intercepto)	7.464e+02 g ⁻¹	2.801e+02 g ⁻¹
<i>Correlation coefficient</i> , r (Coeficiente de Correlação, r)	0.995916	0.99507
<i>C constant</i> (Constante C)	5.807	14.506
<i>Surface Area</i> (Área superficial)	0.804 m ² /g	0.857 m ² /g

Fonte: Acervo Próprio

5 CONCLUSÃO

Diante da crescente necessidade de tornar o uso da biomassa mais sustentável, este trabalho se dedicou a caracterizar física e quimicamente o bagaço de cana-de-açúcar, buscando entender suas propriedades essenciais para o desenvolvimento de tecnologias mais eficientes. Para isso, foram realizados testes de secagem, análises de densidade e a aplicação da técnica BET, fornecendo informações valiosas que contribuem diretamente para o mecanismo de reação em estudo pelo GESESC. Esses dados ajudam a avançar o uso da biomassa de forma eficiente e ambientalmente responsável, promovendo um uso mais sustentável.

Durante o estudo, foi possível não só aprofundar o entendimento sobre os processos de secagem e armazenamento do bagaço de cana, como também assegurar a preservação de suas propriedades e evitar sua deterioração. A análise visual de densidade comprovou a homogeneidade das amostras, enquanto a técnica BET permitiu determinar a área superficial específica, tornando o modelo mais representativo das condições reais. As amostras apresentaram áreas superficiais de $0,804 \text{ m}^2/\text{g}$ e $0,857 \text{ m}^2/\text{g}$, atendendo às expectativas para um material com predominância de mesoporos e proporcionando uma base robusta para simulações de processos.

O estudo enfrentou alguns desafios. Inicialmente, havia a expectativa de trabalhar com diferentes granulometrias para ampliar a abrangência da pesquisa. Contudo, foi possível caracterizar apenas duas granulometrias, em vez das cinco planejadas, e houve uma perda inicial de material devido a um erro no processo de desgaseificação. Apesar desses obstáculos, a segunda rodada de análises mostrou-se promissora e altamente relevante para o desenvolvimento do mecanismo de reação estudado.

Para trabalhos futuros, recomenda-se a análise mais detalhada de características físico-químicas como teor de umidade, fração de voláteis, teor de cinzas e percentual de carbono fixo em amostras regionais de bagaço de cana-de-açúcar. Essas análises complementares poderiam enriquecer ainda mais o mecanismo de reação em desenvolvimento, embora neste trabalho não tenham sido realizadas devido a limitações de equipamentos e materiais disponíveis.

Em conclusão, este trabalho representa um avanço importante para o aprimoramento dos processos de produção de energia sustentável por meio da biomassa de

bagago de cana-de-açúcar. As análises realizadas fornecem uma caracterização detalhada e essencial da biomassa, o que enriquece o mecanismo *BioMass-Mech1.0: A new reaction mechanism for combustion, gasification, and pyrolysis of lignocellulosic biomass*. Esse mecanismo permitirá que as simulações de combustão, gaseificação e pirólise se tornem mais realistas, refletindo com maior precisão as condições e características da biomassa. Desse modo, os resultados tornam-se mais confiáveis e úteis, contribuindo para o avanço do uso eficiente e ambientalmente responsável da biomassa como fonte renovável de energia.

REFERÊNCIAS

ACEVEDO, N. I. A.; ROCHA, M. C. G.; BERTOLINO, L. C. Determinação da Área superficial específica e da porosidade de duas amostras de argilas provenientes da bacia de taubaté - são paulo. **Brazilian Applied Science Review**, v. 5, n. 1, p. 39–57, 2021. Acessado em: 14 out. 2024. Disponível em: <<https://www.cetem.gov.br/antigo/images/periodicos/2021/CAN0001.pdf>>. Citado na página 21.

BASU, P. Biomass gasification and pyrolysis: practical design and theory. Academic press, 2010. Discusses the fundamentals of biomass gasification, including the importance of surface area and reactivity in biomass conversion processes. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 18.

Blog Minitab. **Análise de Regressão: Como Interpretar a Constante (Intercepto Y)**. 2024. Acessado em: 14 out. 2024. Disponível em: <<https://blog.minitab.com/pt/analise-de-regressao-como-interpretar-a-constante-intercepto-y?form=MG0AV3>>. Citado na página 26.

CALPA, L. d. R. S. **Estudo Preliminar da Sinterização de Membranas Macroporosas de Óxido de Magnésio**. Tese (Doutorado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio), 2011. Disponível em: <https://www.maxwell.vrac.puc-rio.br/19423/19423_1.PDF>. Citado 5 vezes nas páginas 21, 22, 23, 24 e 25.

CONAB, C. N. de A. **Produção de cana-de-açúcar cresce 10,9%, estimada em 677,6 milhões de toneladas na safra 2023/24**. 2023. Acesso em: 17 set. 2024. Disponível em: <<https://encurtador.com.br/MTWly>>. Citado na página 18.

DIAS, M. O. S. *et al.* Integrated first and second generation ethanol production from sugarcane. **Chemical Engineering Research and Design**, Elsevier, v. 87, n. 9, p. 1206–1216, 2009. Citado na página 20.

GOODWIN, D. G. *et al.* Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. **Zenodo**, 2022. Disponível em: <<https://zenodo.org/records/6387882>>. Citado na página 28.

LIBRETEXTS, C. **BET Surface Area Analysis of Nanoparticles - Chemistry LibreTexts**. 2024. Acessado em: 14 out. 2024. Disponível em: <[https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Analytical_Chemistry/Physical_Methods_in_Chemistry_and_Nano_Science_\(Barron\)/02:_Physical_and_Thermal_Analysis/2.03:_BET_Surface_Area_Analysis_of_Nanoparticles](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Analytical_Chemistry/Physical_Methods_in_Chemistry_and_Nano_Science_(Barron)/02:_Physical_and_Thermal_Analysis/2.03:_BET_Surface_Area_Analysis_of_Nanoparticles)>. Citado na página 26.

LV, P. *et al.* An investigation into the gasification characteristics of biomass materials in a fixed-bed gasifier. **Biomass and Bioenergy**, Elsevier, v. 27, n. 5, p. 429–437, 2004. Citado na página 17.

MANSARAY, K. G.; GHALY, A. E. Biomass gasification in a fluidized bed gasifier: Experimental and modeling studies. **Biomass and Bioenergy**, Elsevier, v. 17, n. 6, p. 487–507, 1999. Citado na página 17.

McKinsey & Company. Hidrogênio verde: Uma oportunidade de geração de riqueza com sustentabilidade para o Brasil e o mundo. 2023. Acesso em: 2024-11-25. Disponível em: <<https://www.mckinsey.com/br/our-insights/hidrogenio-verde-uma-oportunidade-de-geracao-de-riqueza-com-sustentabilidade-para-o-brasil-e-o-mundo#>>. Citado na página 14.

MME, M. de Minas e E. **Biomassa quebra recorde de geração de energia em 2023**. 2023. Acesso em: 17 set. 2024. Disponível em: <<https://www.gov.br/mme/pt-br/assuntos/noticias/biomassa-quebra-recorde-de-geracao-de-energia-em-2023>>. Citado na página 18.

MORAIS, J. P. S. *et al.* Extraction and characterization of nanocellulose structures from raw cotton linter and sugarcane bagasse. **Carbohydrate Polymers**, Elsevier, v. 91, n. 1, p. 229–235, 2013. Citado na página 20.

NASCIMENTO, R. F. d. **Adsorção: aspectos teóricos e aplicações ambientais**. Fortaleza: Universidade Federal do Ceará, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 24.

PAAR, A. **BET Theory**. 2023. Acessado em: 23 out. 2024. Disponível em: <<https://wiki.anton-paar.com/br-pt/teoria-de-bet/>>. Citado na página 24.

PRODUÇÃO de biocombustíveis cresce no Brasil e alcança recorde histórico. Secretaria Especial de Comunicação Social, 2024. Acessado em: 4 de novembro de 2024. Disponível em: <<https://www.gov.br/secom/pt-%20br/assuntos/noticias/2024/07/producao-de-biocombustiveis-cresce-no-brasil-e-alcanca-recorde-historico?form=MG0AV3>>. Citado na página 14.

ROCHA, G. J. M.; PEREIRA, C. J.; OLIVEIRA, B. R. **Utilização do Bagaço e da Palha de Cana-de-Açúcar para a Produção de Etanol de Segunda Geração**. 2023. Acesso em: 17 set. 2024. Disponível em: <<https://www.esalq.usp.br/visaoagricola/sites/default/files/VA08-pesquisa03.pdf>>. Citado na página 19.

SANTOS, M. L. d.; LIMA, O. J. d.; NASSAR, E. J.; CIUFFI, K. J.; CALEFI, P. S. Estudo das condições de estocagem do bagaço de cana-de-açúcar por análise térmica. **Química Nova**, Sociedade Brasileira de Química, v. 34, n. 3, p. 507–511, 2011. ISSN 0100-4042. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/S0100-40422011000300024>>. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 30.

SAVASTANO, H. *et al.* Brazilian waste fibres as reinforcement for cement-based composites. **Cement and Concrete Composites**, Elsevier, v. 22, n. 5, p. 379–384, 2000. Citado na página 20.

SERRA, R. M. d. A.; PETRUCCI, B. G.; AZEVEDO, C. S. d.; PALHARES, R. A. Aplicação da análise bet para a caracterização de biomassa e resíduos agrícolas: revisão sobre o método e suas implicações. **Revista Brasileira de Energias Renováveis**, v. 9, n. 1, p. 13–25, 2020. Acesso em: 26 set. 2024. Disponível em: <<https://encurtador.com.br/MTWly>>. Citado na página 18.

SIERVO, A. **Tópico 5: Adsorção, dessorção e reações químicas em superfícies**. 2022. Acessado em: 01 out. 2024. Disponível em: <<https://sites.ifi.unicamp.br/asiervo/files/2022/05/Topico5-Adsorcao-dessorcao-e-reacoes-quimicas-em-superficies.pdf>>. Citado na página 21.

SILVA, J. da; OLIVEIRA, M. **Gaseificação e Aproveitamento Energético de Biomassa**. 1. ed. São Paulo, Brasil: Editora Acadêmica, 2024. Discussão sobre processos termoquímicos e a produção de gás de síntese. Citado na página 17.

STANDARDIZATION, I. O. for. **ISO 9277:2010 - Determination of the specific surface area of solids by gas adsorption — BET method**. 2010. Accessed: 2024-10-24. Disponível em: <<https://www.iso.org/standard/71014.html>>. Citado na página 32.

TECH, N. V. **BET (Brunauer–Emmett–Teller) | NanoEarth | Virginia Tech**. Acessado em: 14 out. 2024. Disponível em: <<https://nanoearth.ictas.vt.edu/access/selector/bet.html?form=MG0AV3>>. Citado na página 26.

TILMAN, D.; JOHANSEN, M. **Gaseification of biomass and waste: fundamentals, technology, and application**. [S.l.]: Springer, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 18.

WALTER, A. *et al.* Biomass energy and bioelectricity in brazil: Identifying and overcoming barriers. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, Elsevier, v. 10, n. 2, p. 132–153, 2006. Citado na página 20.

APÊNDICE A – ISOTERMAS - CÓDIGO PYTHON

A.1 GESESC - Grupo de Estudo em Sistemas Térmicos e Simulação Computacional

A.1.1 Caracterização Físico-Química de Biomassa Lignocelulósica Para Avaliação do Potencial Produtivo de Gás de Síntese - Isotermas .

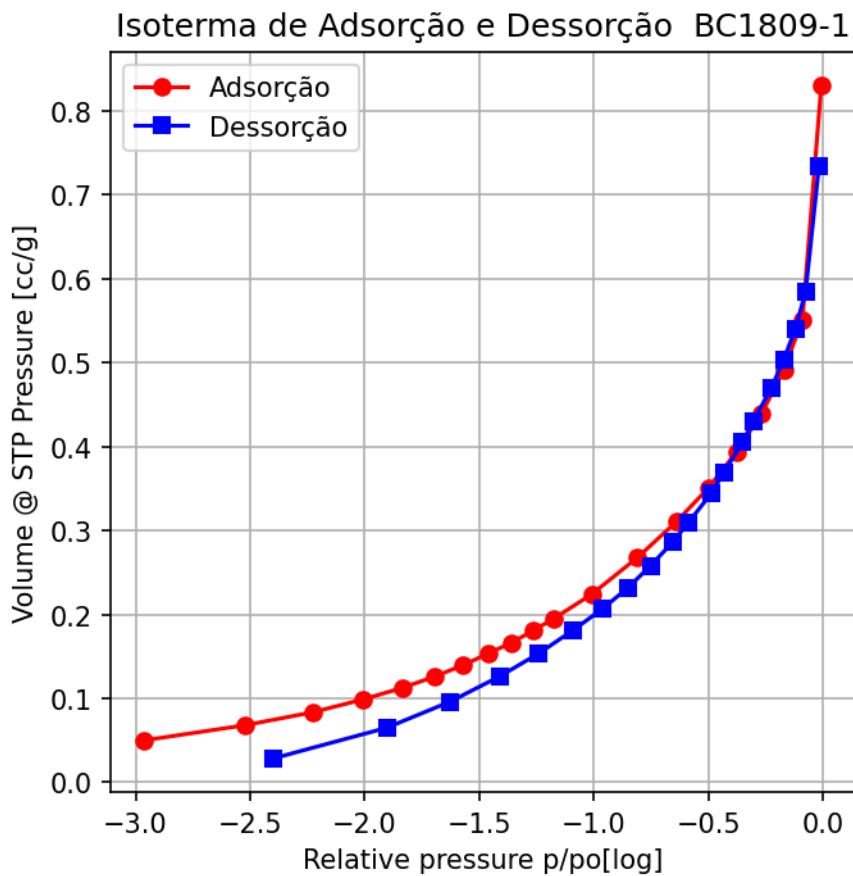
```
[3]: import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

# Carregar o arquivo Excel
bc1 = pd.read_excel("Isoterma_BC1-1.xlsx")

# Converter a coluna 'Relative' para escala logarítmica
bc1['Relative_log'] = np.log(bc1['Relative'])
bc1['Relative_log1'] = np.log(bc1['Relative'])
#display(bc1)

plt.figure(figsize=(5, 5), dpi=150)
plt.plot(bc1['Relative_log1'], bc1['Volume @ STP Pressure [cc/
→g]1'], 'r-o', label='Adsorção')
plt.plot(bc1['Relative_log'], bc1['Volume @ STP Pressure [cc/
→g]'], 'b-s', label='Dessorção')
plt.xlabel('Relative pressure p/po[log]')
plt.ylabel('Volume @ STP Pressure [cc/g]')
plt.title('Isoterma de Adsorção e Dessorção BC1809-1')
plt.legend()
plt.grid(True)
```

```
plt.show()
```



```
[4]: import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

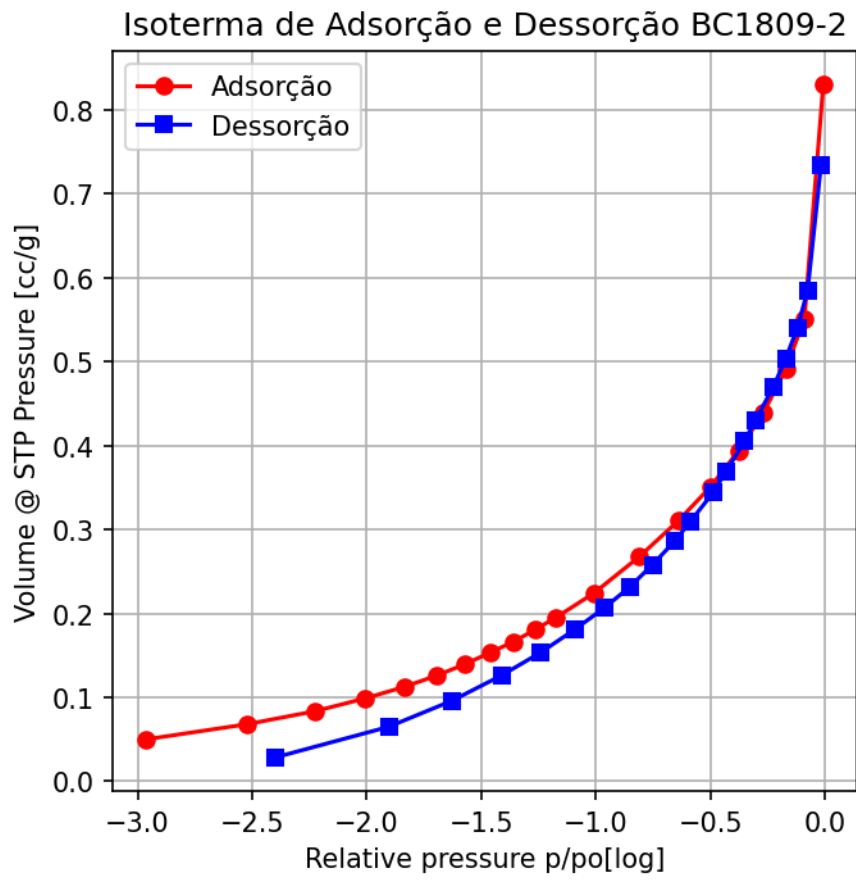
# Carregar o arquivo Excel
bc2 = pd.read_excel("Isoterma_BC1-1.xlsx")
```

```
# Verificar os nomes das colunas antes de qualquer_
↳alteração
#print("Colunas originais:")
#print(bc1.columns)

# Remover espaços em branco extras e caracteres_
↳invisíveis dos nomes das colunas
bc2.columns = bc2.columns.str.strip().str.replace('\n', ' ').str.
↳replace('\r', '')

# Criar colunas logarítmicas
bc2['Relative_log1'] = np.log(bc2['Relative'])
bc2['Relative_log'] = np.log(bc2['Relative'])
#display(bc2)

# Plotar os dados
plt.figure(figsize=(5, 5),dpi=150)
plt.plot(bc2['Relative_log1'], bc2['Volume @ STP Pressure [cc/
↳g]1'], 'r-o', label='Adsorção')
plt.plot(bc2['Relative_log'], bc2['Volume @ STP Pressure [cc/
↳g]'], 'b-s', label='Dessorção')
plt.xlabel('Relative pressure p/po[log]')
plt.ylabel('Volume @ STP Pressure [cc/g]')
plt.title('Isoterma de Adsorção e Dessorção BC1809-2')
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```



ANEXO A – DADOS DA ANÁLISE BET - AMOSTRA BC1809-1.



Analysis

Operator: CEFET EngMat
Sample ID: BC1809-1
Sample Desc: bagaço de cana -1
Sample weight: 1.3906 g
Outgas Time: 24.0 hrs
Analysis gas: Nitrogen
Press. Tolerance: 0.100/0.100 (ads/des)
Analysis Time: 265.8 min
Cell ID: 0

Date: 2023/12/15

Filename: sttn_A_20231214_3.qps
Comment: Marcello Dumont
Sample Volume: 1 cc
OutgasTemp: 100.0 C
Bath Temp: 273.0 K
Equil time: 60/60 sec (ads/des)
End of run: 2023/12/15 21:19:17

Report

Operator: quantachrome

Date: 2023/12/15

Equil timeout: 240/240 sec (ads/des)
Instrument: Nova Station A

Analysis Data

Administrative information

Analysis performed on: 2023/12/15
Analysis performed by: CEFET EngMat
Comments: Marcello Dumont
Instrument: NOVA Station: A
Instrument version: 0.00
Software version: 11.0

Sample information

Id: BC1809-1
Description: bagaço de cana -1
Weight: 1.3906 g
Volume: 1 cc

Sample preparation information

Outgas time: 24.0 hrs
Outgas temperature: 100.0 C

Analysis information

Ambient temperature: 298 K
Thermal delay: 300 sec
Pressure tolerance: 0.100/0.100 (ads/des)
Equilibration time: 60/60 sec (ads/des)
Equilibration timeout: 240/240 sec (ads/des)

Data Reduction Parameters

t-Method	Calc. method: de Boer		
BJH/DH method	Moving pt. avg.: off	Ignoring P-tags below 0.35 P/Po	
DFT method	Calc. Model: N2 at 77 K on carbon (slit pore, NLDFT equilibrium model)		
	Rel. press. range: 0.0000 - 1.0000		Moving pt. avg: off
Adsorbate model	Nitrogen	Temperature 77.350K	
	Molec. Wt.: 28.013	Cross Section: 16.200 Å ²	Liquid Density: 0.808 g/cc

Volume/Area summary

Surface Area Data

SinglePoint BET	5.873e-01 m ² /g
MultiPoint BET	8.035e-01 m ² /g
BJH method cumulative adsorption surface area	5.156e-01 m ² /g
DH method cumulative adsorption surface area	5.352e-01 m ² /g
DFT cumulative surface area	3.386e-01 m ² /g

Pore Volume Data

BJH method cumulative adsorption pore volume	1.187e-03 cc/g
DH method cumulative adsorption pore volume	1.172e-03 cc/g
HK method micropore volume	1.681e-04 cc/g
SF method micropore volume	4.866e-05 cc/g
DFT method cumulative pore volume	1.009e-03 cc/g

Pore Size Data

BJH method adsorption pore Radius (Mode Dv(r))	1.637e+01 Å
DH method adsorption pore Radius (Mode Dv(r))	1.637e+01 Å
HK method pore Radius (Mode)	1.838e+00 Å
SF method pore Radius (Mode)	2.261e+00 Å
DFT pore Radius (Mode)	1.585e+01 Å



Analysis

Operator: CEFET EngMat
Sample ID: BC1809-1

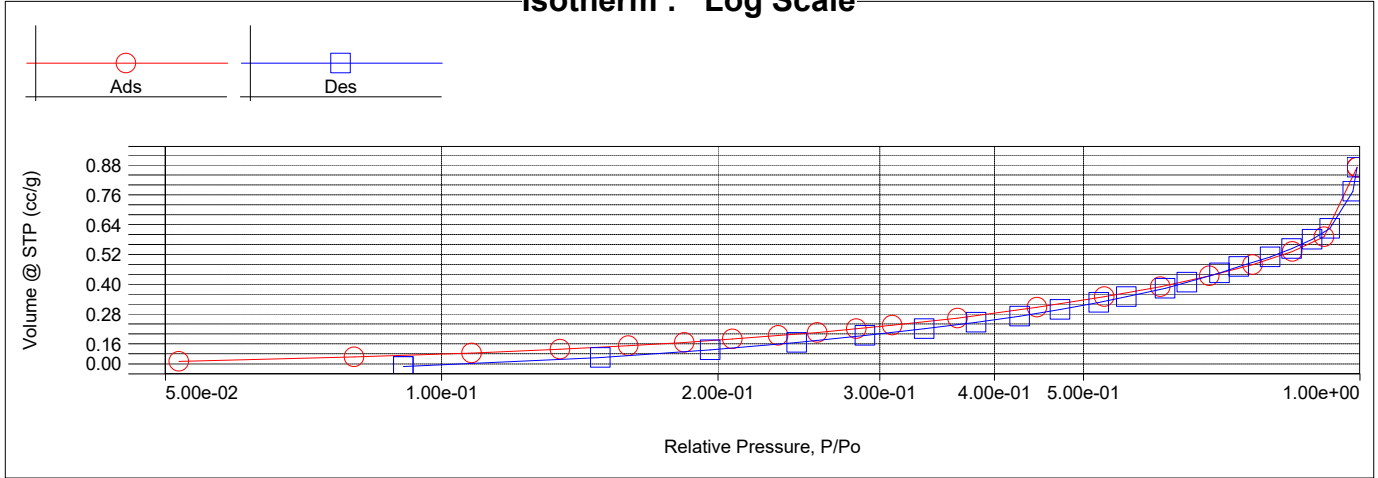
Date:2023/12/15
Filename:

Report

Operator: quantachrome
stn_A_20231214_3.qps

Date:2023/12/15

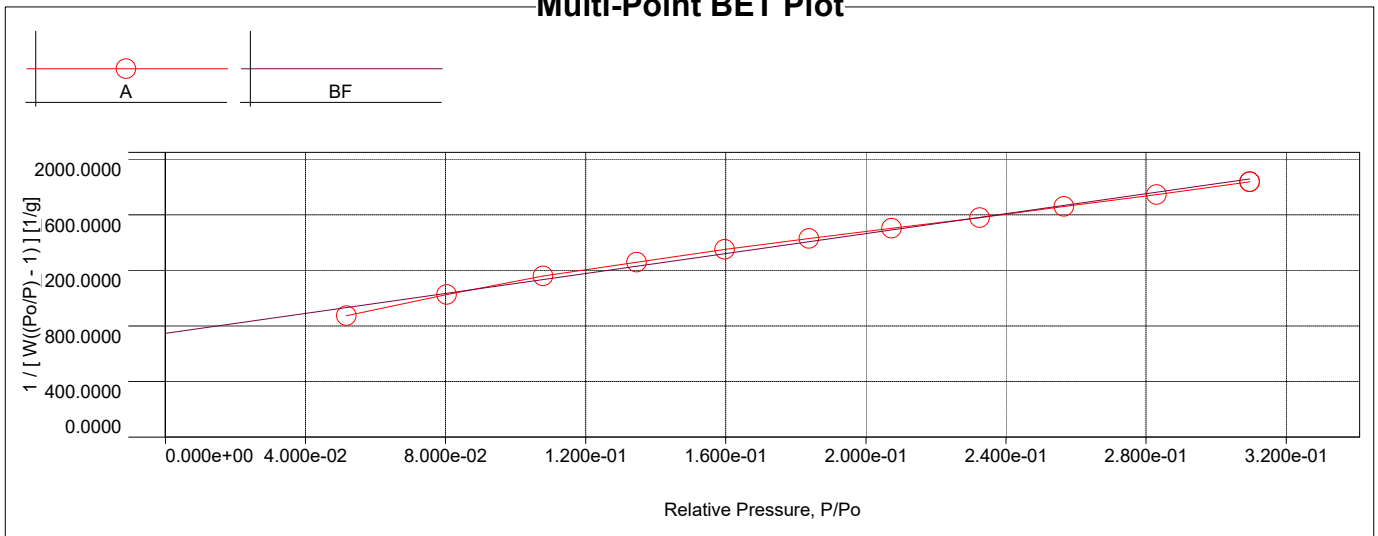
Isotherm : Log Scale



Isotherm

Relative Pressure	Volume @ STP [cc/g]	Relative Pressure	Volume @ STP [cc/g]	Relative Pressure	Volume @ STP [cc/g]
5.17380e-02	0.0501	6.06380e-01	0.3506	6.13892e-01	0.3441
8.03330e-02	0.0681	6.85717e-01	0.3937	5.56925e-01	0.3102
1.07853e-01	0.0835	7.64794e-01	0.4390	5.19760e-01	0.2866
1.34543e-01	0.0989	8.44645e-01	0.4921	4.71458e-01	0.2582
1.59693e-01	0.1127	9.14787e-01	0.5516	4.26378e-01	0.2315
1.83809e-01	0.1261	9.93351e-01	0.8309	3.82073e-01	0.2068
2.07427e-01	0.1394	9.83074e-01	0.7336	3.35540e-01	0.1809
2.32561e-01	0.1537	9.27544e-01	0.5849	2.89165e-01	0.1535
2.56543e-01	0.1663	8.87591e-01	0.5409	2.43652e-01	0.1261
2.83020e-01	0.1811	8.43041e-01	0.5037	1.96274e-01	0.0960
3.09584e-01	0.1955	7.99044e-01	0.4704	1.48959e-01	0.0650
3.64901e-01	0.2243	7.38822e-01	0.4306	9.08380e-02	0.0285
4.45368e-01	0.2680	7.03743e-01	0.4051		
5.27185e-01	0.3104	6.48561e-01	0.3686		

Multi-Point BET Plot





Analysis

Operator: CEFET EngMat
Sample ID: BC1809-1

Date: 2023/12/15
Filename:

Report

Operator: quantachrome
stn_A_20231214_3.qps

Date: 2023/12/15

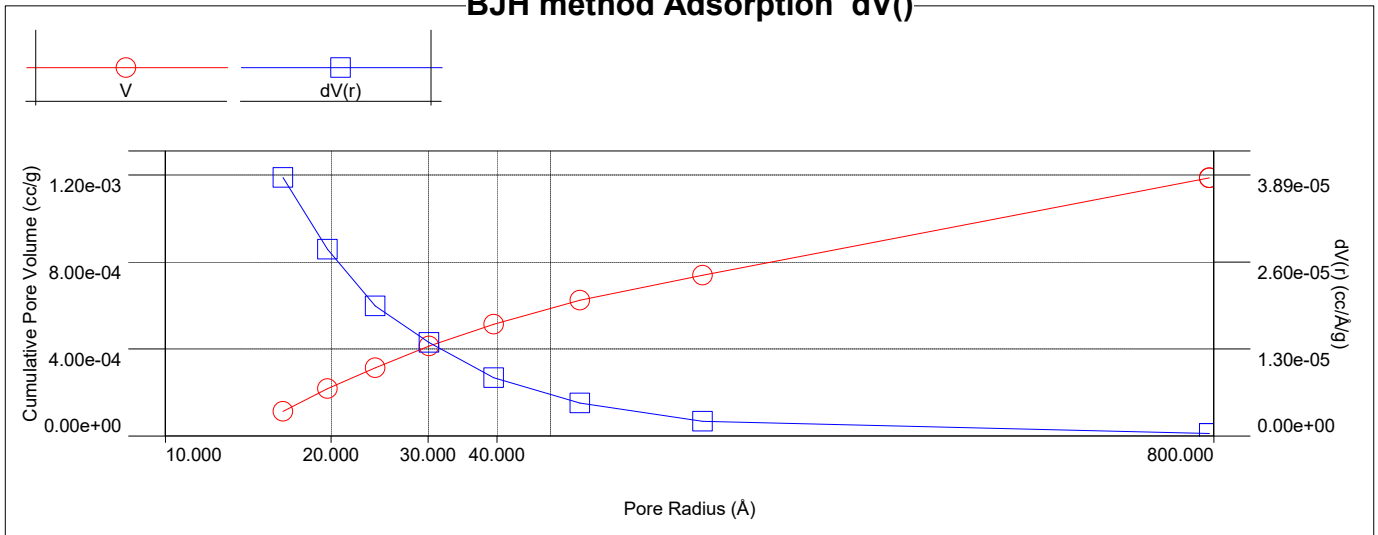
Multi-Point BET

Relative Pressure [P/Po]	Volume @ STP [cc/g]	1 / [W((Po/P) - 1)] [1/g]	Relative Pressure [P/Po]	Volume @ STP [cc/g]	1 / [W((Po/P) - 1)] [1/g]
5.17380e-02	0.0501	8.7198e+02	2.07427e-01	0.1394	1.5022e+03
8.03330e-02	0.0681	1.0261e+03	2.32561e-01	0.1537	1.5777e+03
1.07853e-01	0.0835	1.1578e+03	2.56543e-01	0.1663	1.6599e+03
1.34543e-01	0.0989	1.2572e+03	2.83020e-01	0.1811	1.7440e+03
1.59693e-01	0.1127	1.3492e+03	3.09584e-01	0.1955	1.8356e+03
1.83809e-01	0.1261	1.4295e+03			

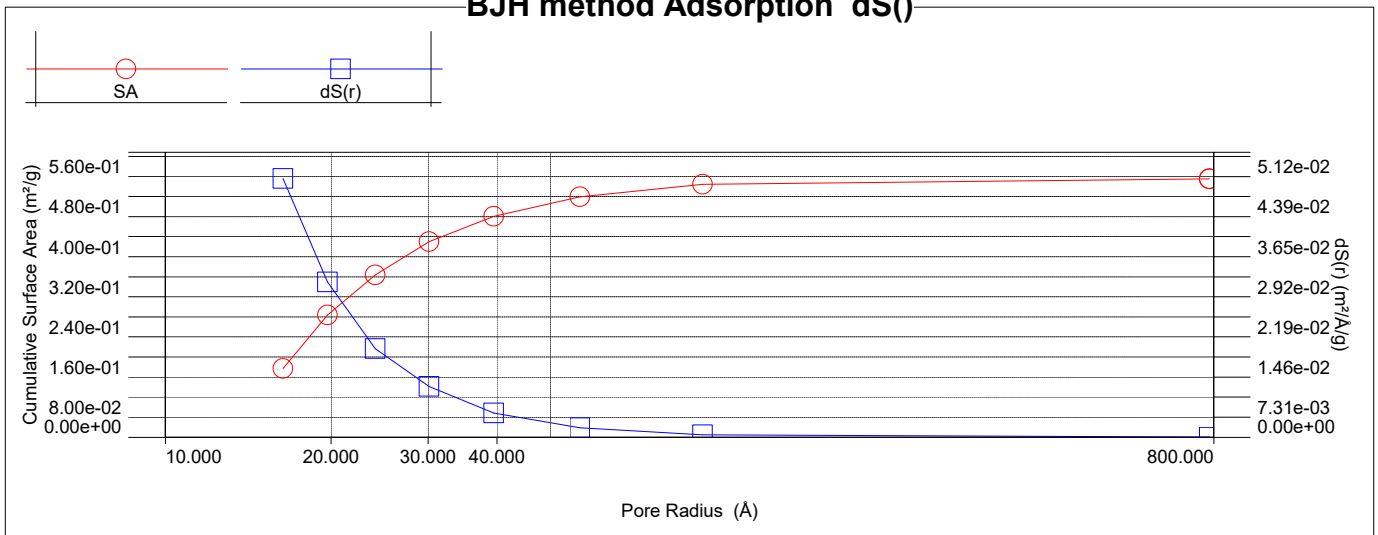
MBET summary

Slope = 3587.746 1/g
 Intercept = 7.464e+02 1/g
 Correlation coefficient, r = 0.995916
 C constant = 5.807
 Surface Area = 0.804 m²/g

BJH method Adsorption dV()



BJH method Adsorption dS()



ANEXO B – DADOS DA ANÁLISE BET - AMOSTRA BC1809-2.



Analysis

Operator: CEFET EngMat
Sample ID: BC1809-2
Sample Desc: Bagaço de cana - 2
Sample weight: 0.4909 g
Outgas Time: 24.0 hrs
Analysis gas: Nitrogen
Press. Tolerance: 0.100/0.100 (ads/des)
Analysis Time: 275.8 min
Cell ID: 0

Date: 2023/12/15

Filename: sttn_B_20231214_3.qps
Comment: Marcello Dumont
Sample Volume: 1 cc
OutgasTemp: 100.0 C
Bath Temp: 273.0 K
Equil time: 60/60 sec (ads/des)
End of run: 2023/12/15 21:29:15

Report

Operator: quantachrome
Date: 2023/12/15

Date: 2023/12/15

Equil timeout: 240/240 sec (ads/des)
Instrument: Nova Station B

Analysis Data

Administrative information

Analysis performed on:.....2023/12/15
Analysis performed by:.....CEFET EngMat
Comments:.....Marcello Dumont
Instrument:.....NOVA Station: B
Instrument version:.....0.00
Software version:.....11.0

Sample information

Id:.....BC1809-2
Description:.....Bagaço de cana - 2
Weight:.....0.4909 g
Volume:.....1 cc

Sample preparation information

Outgas time:.....24.0 hrs
Outgas temperature:.....100.0 C

Analysis information

Ambient temperature:.....298 K
Thermal delay:.....300 sec
Pressure tolerance:.....0.100/0.100 (ads/des)
Equilibration time:.....60/60 sec (ads/des)
Equilibration timeout:.....240/240 sec (ads/des)

Data Reduction Parameters

t-Method	Calc. method: de Boer		
BJH/DH method	Moving pt. avg.: off	Ignoring P-tags below 0.35 P/Po	
DFT method	Calc. Model: N2 at 77 K on carbon (slit pore, NLDFT equilibrium model)		
	Rel. press. range: 0.0000 - 1.0000		Moving pt. avg: off
Adsorbate model	Nitrogen	Temperature 77.350K	
	Molec. Wt.: 28.013	Cross Section: 16.200 Å ²	Liquid Density: 0.808 g/cc

Volume/Area summary

Surface Area Data

SinglePoint BET.....	7.427e-01 m ² /g
MultiPoint BET.....	8.571e-01 m ² /g
BJH method cumulative adsorption surface area.....	4.632e-01 m ² /g
DH method cumulative adsorption surface area.....	4.792e-01 m ² /g
DFT cumulative surface area.....	4.221e-01 m ² /g

Pore Volume Data

BJH method cumulative adsorption pore volume.....	1.871e-03 cc/g
DH method cumulative adsorption pore volume.....	1.834e-03 cc/g
HK method micropore volume.....	2.546e-04 cc/g
SF method micropore volume.....	1.031e-04 cc/g
DFT method cumulative pore volume.....	1.420e-03 cc/g

Pore Size Data

BJH method adsorption pore Radius (Mode Dv(r)).....	1.629e+01 Å
DH method adsorption pore Radius (Mode Dv(r)).....	1.629e+01 Å
HK method pore Radius (Mode).....	1.838e+00 Å
SF method pore Radius (Mode).....	2.261e+00 Å
DFT pore Radius (Mode).....	1.448e+01 Å



Analysis

Operator: CEFET EngMat
Sample ID: BC1809-2

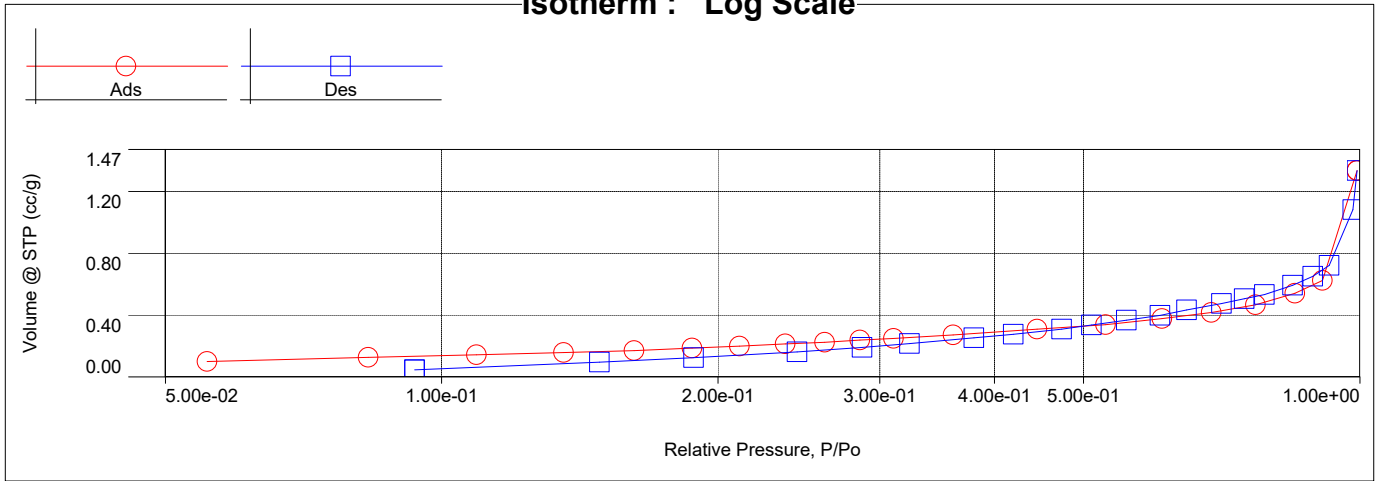
Date:2023/12/15
Filename:

Report

Operator: quantachrome
stn_B_20231214_3.qps

Date:2023/12/15

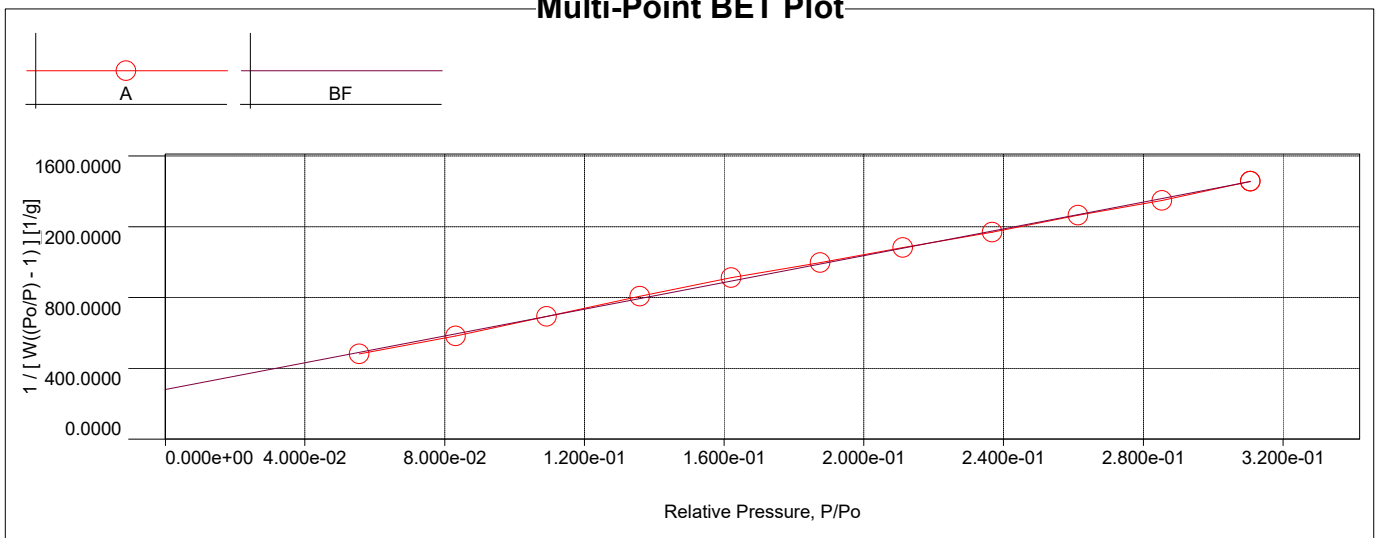
Isotherm : Log Scale



Isotherm

Relative Pressure	Volume @ STP [cc/g]	Relative Pressure	Volume @ STP [cc/g]	Relative Pressure	Volume @ STP [cc/g]
5.55380e-02	0.0978	6.08837e-01	0.3758	6.06088e-01	0.3976
8.31680e-02	0.1247	6.89469e-01	0.4161	5.57114e-01	0.3669
1.09172e-01	0.1415	7.69904e-01	0.4661	5.10273e-01	0.3346
1.35854e-01	0.1559	8.50134e-01	0.5403	4.73551e-01	0.3074
1.62039e-01	0.1696	9.10719e-01	0.6229	4.19364e-01	0.2743
1.87466e-01	0.1853	9.93264e-01	1.3340	3.79980e-01	0.2511
2.11155e-01	0.1979	9.83303e-01	1.0814	3.23336e-01	0.2145
2.36787e-01	0.2124	9.25917e-01	0.7201	2.87025e-01	0.1901
2.61377e-01	0.2237	8.89313e-01	0.6495	2.43904e-01	0.1611
2.85382e-01	0.2368	8.45521e-01	0.5924	1.88177e-01	0.1241
3.10651e-01	0.2475	7.87519e-01	0.5325	1.48619e-01	0.0936
3.60730e-01	0.2701	7.48704e-01	0.5044	9.34450e-02	0.0451
4.45067e-01	0.3074	7.07092e-01	0.4732		
5.28796e-01	0.3365	6.47755e-01	0.4319		

Multi-Point BET Plot





Analysis

Operator: CEFET EngMat
Sample ID: BC1809-2

Date: 2023/12/15
Filename:

Report

Operator: quantachrome
stn_B_20231214_3.qps

Date: 2023/12/15

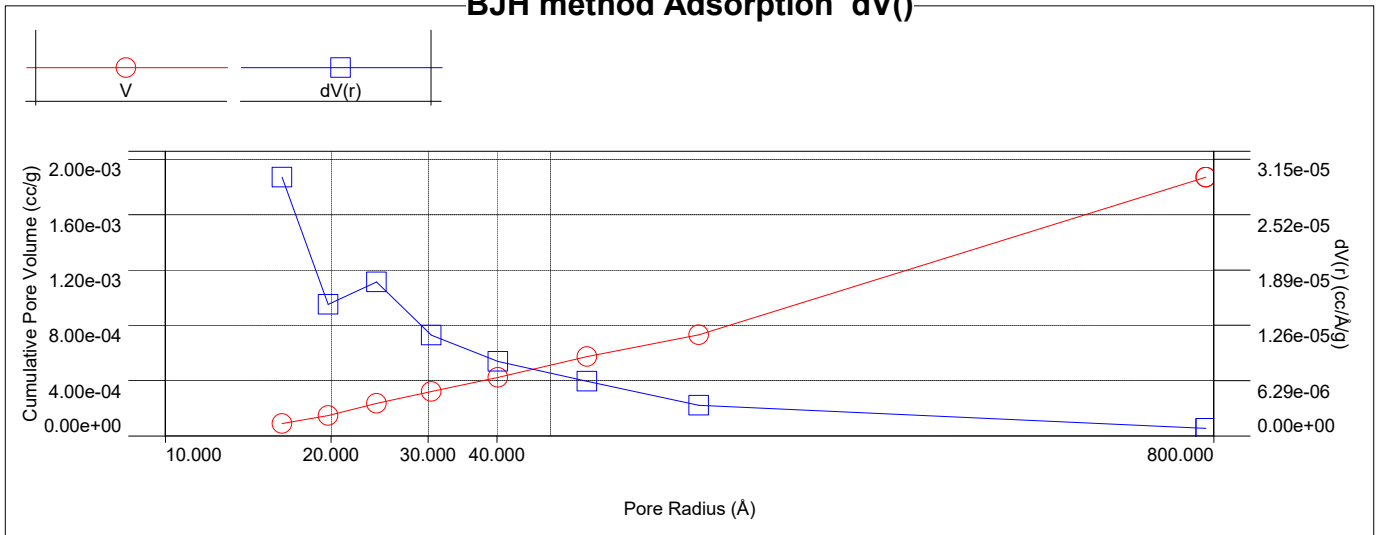
Multi-Point BET

Relative Pressure [P/Po]	Volume @ STP [cc/g]	1 / [W((Po/P) - 1)] [1/g]	Relative Pressure [P/Po]	Volume @ STP [cc/g]	1 / [W((Po/P) - 1)] [1/g]
5.55380e-02	0.0978	4.8116e+02	2.11155e-01	0.1979	1.0823e+03
8.31680e-02	0.1247	5.8199e+02	2.36787e-01	0.2124	1.1687e+03
1.09172e-01	0.1415	6.9297e+02	2.61377e-01	0.2237	1.2655e+03
1.35854e-01	0.1559	8.0665e+02	2.85382e-01	0.2368	1.3491e+03
1.62039e-01	0.1696	9.1213e+02	3.10651e-01	0.2475	1.4567e+03
1.87466e-01	0.1853	9.9612e+02			

MBET summary

Slope =	3783.119 1/g
Intercept =	2.801e+02 1/g
Correlation coefficient, r =	0.999507
C constant =	14.506
Surface Area =	0.857 m ² /g

BJH method Adsorption dV()



BJH method Adsorption dS()

